Agilent G1701DA
GC/MSD ChemStation

入门指南

Agilent Technologies

声明

Agilent Technologies, Inc. 2006

按照美国和国际版权法的规定，未经 Agilent Technologies, Inc. 事先同意和书面许可，不得以任何形式或采取任何手段（包括电子存储和检索或翻译成其它语言）复制本手册中的任何内容。

手册部件号

G1701-97061

版本

2006 年 6 月

美国印刷

Agilent Technologies, Inc.

5301 Stevens Creek Boulevard

Santa Clara, CA 95052

担保

本文档中包含的材料按“现状”提供，若在后续版本中有任何更改，恕不另行通知。而且，在适用法律允许的最大范围内，Agilent 不对本手册及其所包含的信息做出任何明示或暗示的担保，其中包括但不限于对适销性和对具体用途适用性的暗示的担保。Agilent 不对因提供、使用或执行本文档或其中所包含的信息而造成的任何错误或任何意外或附带的损失承担责任。如果 Agilent 与用户签有单独的书面协议，且协议中涉及本文档所含材料的担保条款与上述条款发生冲突，则该书面协议中的担保条款具有优先法律效力。

安全声明

小心

小心事项表示存在危险。它表示在执行某个操作步骤或操作方法时必须加以注意；如果操作不当或没有遵守相应的规程，则可能会导致产品损坏或重要数据丢失。只有完全理解并符合指定的条件时，才可以忽略**小心**事项的要求继续进行操作。

警告

警告事项表示存在危险。它表示在执行某个操作步骤或操作方法时必须加以注意；如果操作不当或没有遵守相应的规程，则可能会导致人身伤亡。只有完全理解并符合指定的条件时，才可以忽略警告事项的要求继续进行操作。

目录

1 GC/MSD ChemStation 快速参考

本书内容 6

在哪里可以获得帮助 7

本版本中的新增内容 14

硬件 15

ChemStation 视图 18

ChemStation 常用任务 27

错误消息和故障排除 48

2 了解定量

定量 56

定量数据库 59

指南 — 使用自动定量设置 67

3 使用定制报告

定制报告 82

创建报告模板 83

定制报告 87

选择单元格、行和列 92

打印报告 94

创建定制报告数据库 97

选择多个数据文件 100

查看和打印图表 102

定制报告工具栏按钮 103

1
GC/MSD ChemStation 快速参考

本书内容 6
在哪里可以获得帮助 7
本版本中的新增内容 14
硬件 15
ChemStation 视图 18
ChemStation 常用任务 27
错误消息和故障排除 48

本书内容

本文档包含系统中各项内容的概述。旨在帮助您学习使用 GC/MSD 系统。

在下面的内容中您可以看到：

- 关于在哪里可以获得其它帮助的详细信息
- 标明主要部件的硬件照片
- GC/MSD ChemStation 软件中的每个工具栏
- ChemStation 常用操作的步骤
- 简要维护计划
- 关于操作技巧、错误消息和故障排除的简要说明
- 关于在 GC/MSD ChemStation 中如何进行定量工作的说明，以及附有帮助您学习使用省时自动定量功能的指南
- 关于如何使用 “定制报告” 软件的快速参考

有关详细信息，请参考联机帮助及提供给您的 CD-ROM 或 DVD-ROM 中的电子手册和视频。

在哪里可以获得帮助

随系统一起提供给您的有大量的参考资料，包括印刷的手册、联机帮助文件和 CD-ROM 或 DVD-ROM 中的电子手册。

每个硬件都附带 CD-ROM 或 DVD-ROM, CD-ROM 或 DVD-ROM 包含几百页的深入详细的参考资料和有关维护的视频，该视频演示了如何操作、维护和排除设备的故障。

此硬件参考资料包括关于以下内容的详细信息：

- 操作硬件
- 维护硬件
- 硬件故障排除

联机帮助文件中包含大量软件操作说明，也包括使用 GC/MSD ChemStation（增强型、汽油中的芳香物族化合物、药物分析、环境）软件的指南。其中包括以下内容的任务和参考信息：

数据分析

- 分析数据
- 命令和功能
- 使用和编写宏
- 术语表

MSD 系统配置

- 配置仪器
- 配置 GPIB 卡
- 排除网络故障
- MSDCHEM.INI 中典型的 PCS 信息

仪器控制

- 使用仪器控制
- 使用方法
- 使用序列
- 分析数据
- 使用批处理模式
- 调谐 （校正） MSD
- MSD 故障排除
- 安全控制
- 报告管理器
- 命令和功能
- 使用和编写宏
- 术语表

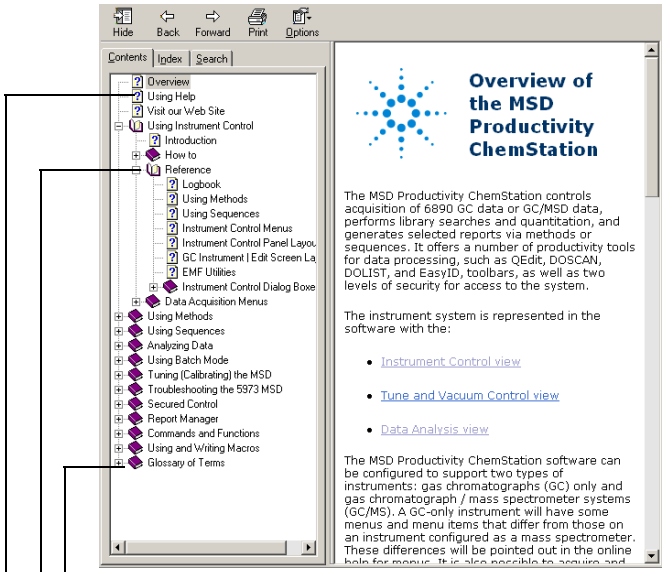
印刷版文档是用来帮助您学习并运行该软件。这些文档包括：

- GC/MSD ChemStation 入门指南 （本文档）
- 现场准备工作检查清单
- 硬件安装检查清单
- 硬件操作手册
- 药物分析入门指南

使用联机帮助文件

联机帮助文件包含了关于仪器控制、数据采集、数据分析、方法、序列、调谐、故障排除和如何使用系统命令和变量的大量信息和指南。

要访问联机帮助，请在任一窗口的“帮助”菜单中选择**帮助**主题，或在任一对话框中单击“帮助”按钮。



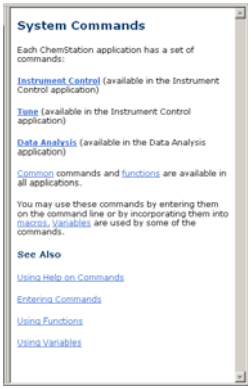
项目	说明
隐藏 / 显示	打开或关闭帮助主题列表的显示。
后退	返回到上一帮助主题。
打印	打印当前内容或帮助主题。
目录	显示帮助主题列表（如上所示）。
索引	对特定的主题使用关键词搜索帮助索引。
搜索	键入词或短语，然后显示联机帮助中包含这些词的主题列表。
选项	变换不同的帮助选项，例如选项卡的显示。

“帮助”图标

表示书中包含多个帮助主题。要打开一本书，请将其选中然后双击。

表示已打开包含帮助主题的书。要关闭一本已打开的书，请将其选中然后双击。

表示一个帮助主题。要跳到某一帮助主题，请将其选中然后双击。

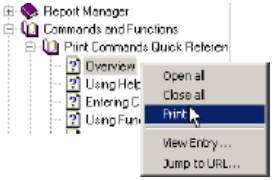


打印一个单独的帮助主题：

1 高亮显示要打印的主题（例如**概述**）。

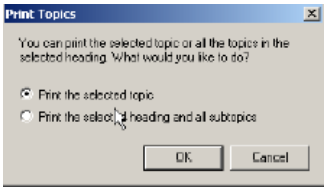
2 单击鼠标右键并选择**打印**？

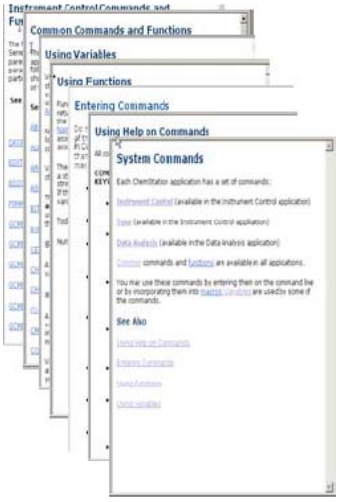
3 选择**打印选定主题**，并单击**确定**。



4 确认选定的打印机并单击**打印**。

5 将打印有关那个主题的信息。不会打印与其相链接的主题。



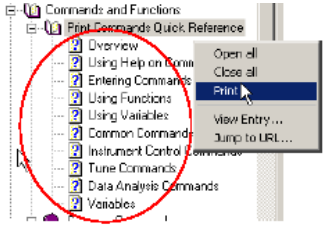


要立刻打印标题下的全部次主题：

1 高亮显示要打印的主题（例如，**打印命令快速参考**）。

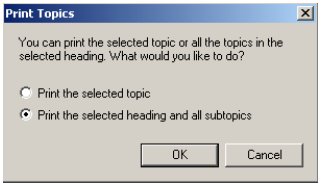
2 单击鼠标右键并选择**打印**？

3 选择**打印选定标题及全部次主题**，并单击**确定**。



4 确认选定的打印机，并单击**打印**。

5 将打印选定主题标题下的全部主题信息。在这种情况下，将打印**打印命令快速参考**下的全部主题，大约 26 页的信息。



注意

即使光标在此标题的一个主题（比方说，**调谐命令**）上，在您选择**打印全部主题**时，也会获得此标题下全部主题的副本，而不是列表中光标所在位置下的主题。

CD-ROM 或 DVD-ROM 中的硬件手册

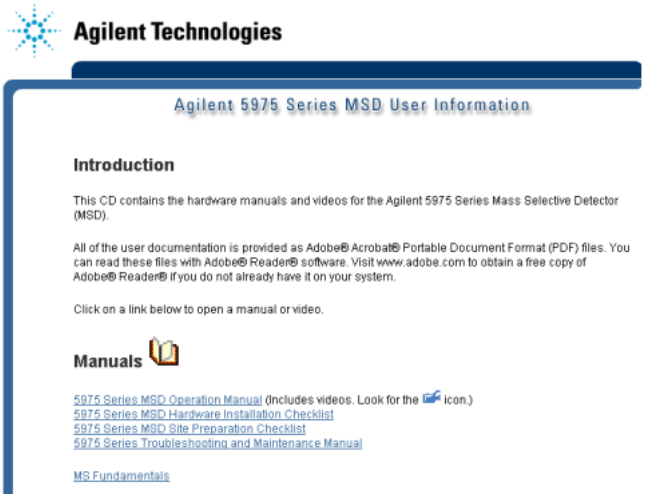
每个硬件上都配有 CD-ROM 或 DVD-ROM，其中包含几百页参考资料和视频，用于描述如何对仪器进行操作、维护和故障排除。

使用 CD-ROM 或 DVD-ROM 中的手册

1 CD-ROM 或 DVD-ROM 中的手册是以 Adobe Acrobat PDF 格式提供的。视频合并在 PDF 手册中（可能需要用 QuickTime），可使用 Microsoft Media Player 直接从 CD-ROM 或 DVD-ROM 上播放视频。

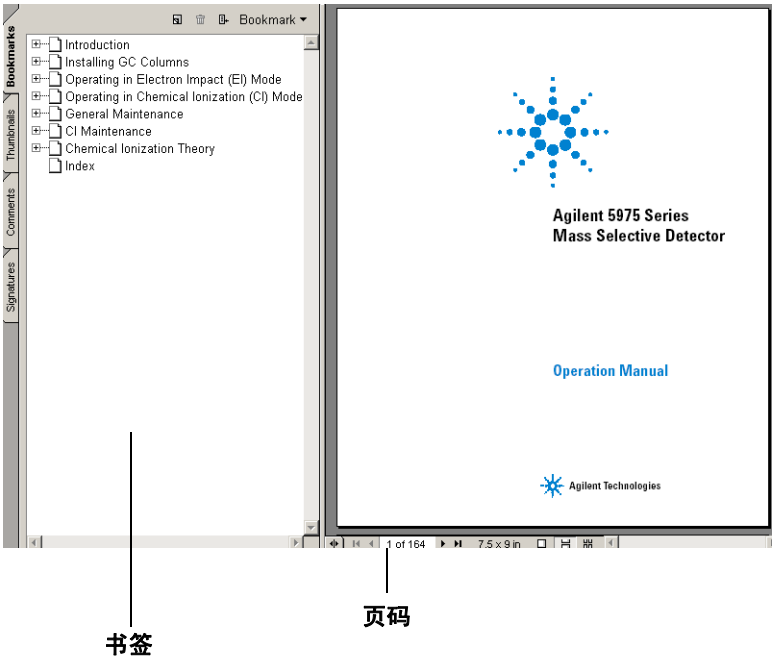
- 如果您没有 Adobe Acrobat 阅读软件，可访问 Adobe.com 免费下载。
- 访问 Apple.com/quicktime 可免费下载 QuickTime。

2 在光驱中插入 CD-ROM 或 DVD-ROM，它会自动显示打开的菜单，列出 CD-ROM 或 DVD-ROM 中的所有书，如下所示：

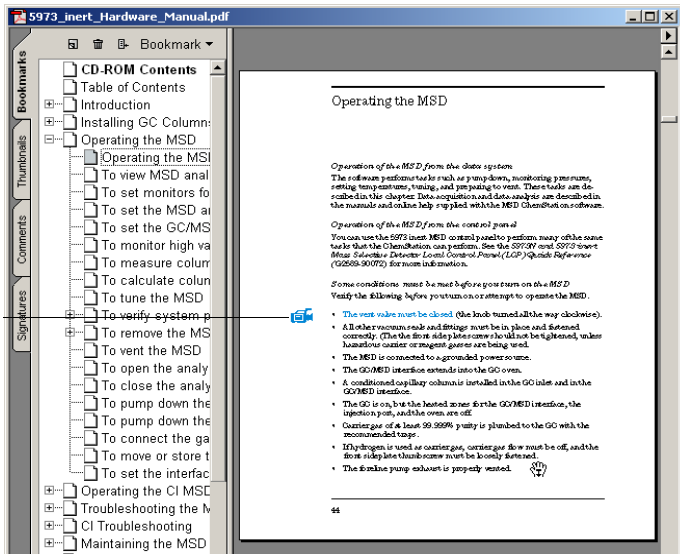

Agilent Technologies
Agilent 5975 Series MSD User Information
Introduction
This CD contains the hardware manuals and videos for the Agilent 5975 Series Mass Selective Detector (MSD).
All of the user documentation is provided as Adobe® Acrobat® Portable Document Format (PDF) files. You can read these files with Adobe® Reader® software. Visit www.adobe.com to obtain a free copy of Adobe® Reader® if you do not already have it on your system.
Click on a link below to open a manual or video.
Manuals
5975 Series MSD Operation Manual (Includes videos. Look for the icon.)
5975 Series MSD Hardware Installation Checklist
5975 Series MSD Site Preparation Checklist
5975 Series Troubleshooting and Maintenance Manual
MS Fundamentals

在“用户信息 CD-ROM 或 DVD-ROM”中打开菜单的示例

3 将光标移动到所列书中任一本上。在光标变为选择**手形**时，单击鼠标左键以选择此书。将会显示书的第一页和书签。



4 单击左列的任一**书签**（例如，**操作 MSD**），即会显示相应的页。



“视频”图标

5 **视频**图标可标识包含视频的区域。单击此图标可以看到怎样执行维护程序。单击鼠标左键可播放视频剪辑。视频播放结束时会自动停止，或者无论何时您要停止播放，只要按 Esc 键即可将其停止。

1 Vent the MSD. See page 64.

6 将光标移至交叉参照时，光标会变成一个选择手形，表示文本已电子链接至所指示的页。单击交叉参照，跳至所指示的页。单击鼠标右键，*返回*至上一页。

7 可以打印任一单个页面或一组页面。选择**打印**，然后通过显示在屏幕底部的页码输入要打印的页面范围。

本版本中的新增内容

要查看此版本软件全部更新内容的说明，有两种方法：

- 在初始化配置后，当提示 “现在是否要查看自述文件？”时，请选择 “是”。
- 在 “数据分析”或 “仪器控制”视图中，选择**帮助 / 查看版本自述文件**。

在弹出窗口中显示文本文件。可滚动浏览此文本并联机阅读此文本，电子搜索此文本，或者如果需要，可以将其复制。

完成后请选择**文件 / 退出**，返回到应用程序。

硬件

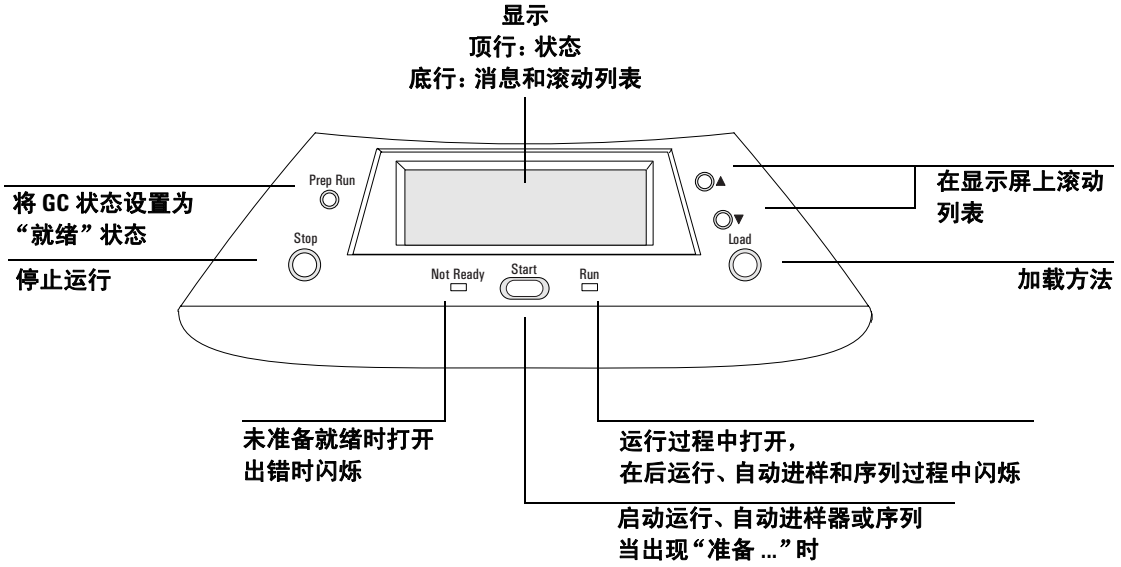
配有 6890 GC 的 5975 系列 MSD

6850 GC 的键盘和显示屏

GC/MSD ChemStation 软件可以控制 6850 GC。这样您就可以使用软件代替键盘来控制仪器。然而，有的时候您可能想用键盘快速执行下列任务之一。

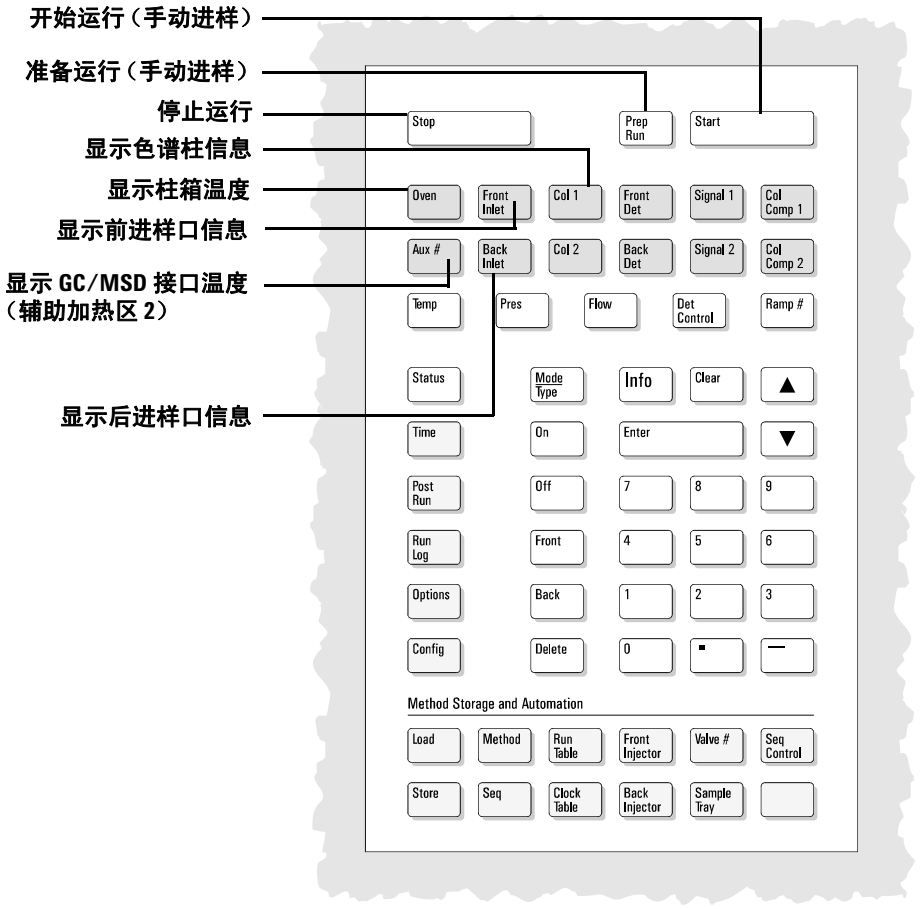
根据控制模块或 GC/MSD ChemStation 设定的配置，在运行中滚动显示可显示以下内容：

- 柱箱温度
- 进样口压力
- 色谱柱流速
- 原始检测器信号
- 消息
- 序列信息
- 运行时间



6890 GC 的键盘

GC/MSD ChemStation 软件可以控制 6890 GC。这样您就可以使用软件代替键盘来控制仪器。然而，有的时候您可能想用键盘快速执行下列任务之一。



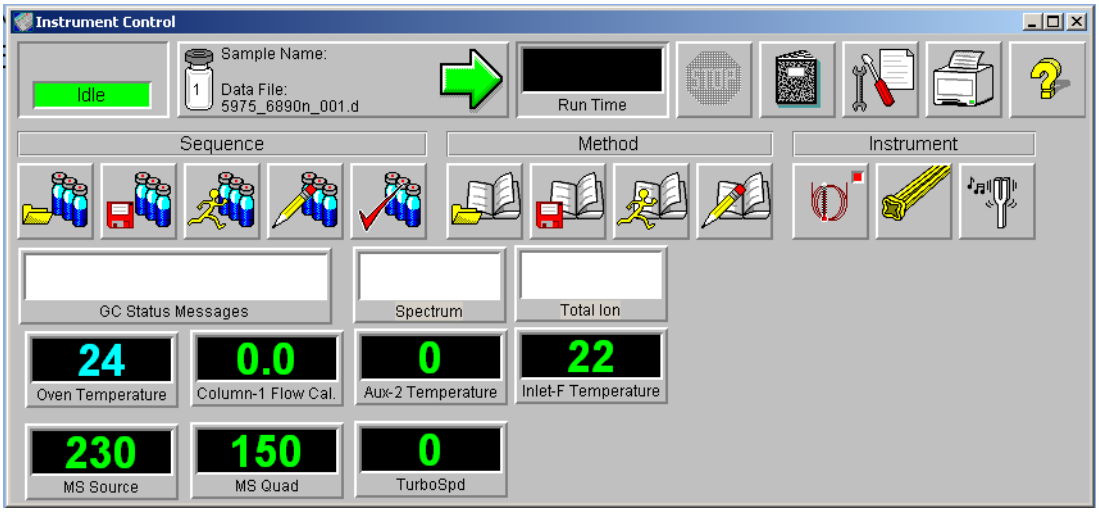
ChemStation 视图

“仪器控制”视图

在您启动 GC/MSD ChemStation 时会显示 “仪器控制”视图。在这里您可以设置和监视仪器参数。如果处于不同的视图，在准备设置数据采集系统时，请选择**视图 / 仪器控制**。

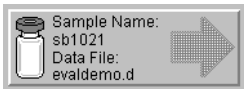
注意

有关软件中使用的菜单、按钮或窗口的更详细信息，请参阅联机帮助。



采集状态指示灯
显示当前运行状态。

运行时间
显示运行的剩余时间。



开始运行
显示为运行准备的样品名称和数据文件。

停止
运行中停止标志为红色，未运行时停止标志为灰色。系统处于 “预运行” 、“运行” 或 “后运行” 时，可使用此按钮停止系统。如果系统处于 “运行” 状态，用 “停止” 按钮后将进入 “后运行”。如果系统处于 “后运行”，用 “停止” 按钮后将进入 “空闲” 状态。

工作日志
显示工作日志弹出菜单。

维护结果
显示 “选择维护信息预报 (EMF) 操作” 对话框。

打印
显示带有可打印项目的对话框，这些可打印项目如序列日志、当前序列、仪器参数、“数据分析” 参数及详细的 “数据分析” 参数。

帮助
显示 “仪器控制” 视图的帮助，并允许访问帮助系统的其它部分。

加载序列
打开 “加载序列” 对话框。

保存序列
打开 “保存序列” 对话框。

运行序列
打开 “开始序列”对话框。

编辑序列
打开 “样品日志表”对话框。

模拟序列
测试序列。

加载方法
打开 “加载方法”对话框。

保存方法
保存当前方法。

运行方法
打开 “开始运行”对话框。

编辑方法
编辑当前方法。

GC 参数
编辑 GC 参数和 GC 监视窗。

MS 参数
编辑 MS 参数和 MS 监视窗。

调谐参数
调谐 MSD。

“数据分析”视图

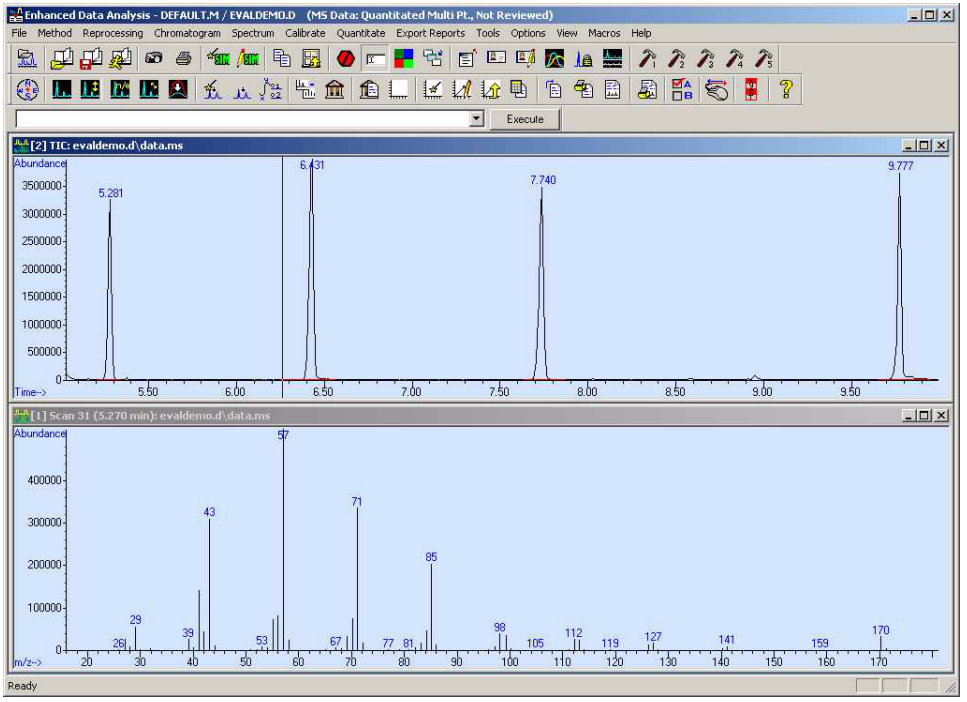
在启动数据分析期间会显示“数据分析”视图，或者在“仪器控制”视图中选择**视图 / 数据　分析（脱机）**，也会显示“数据分析”视图。使用“数据分析”视图可执行如下任务：

- 设置积分参数
- 校正方法
- 定量数据
- 自定义报告和打印报告

数据分析也包含各种提高效率的工具，例如 :QEdit, DOSCAN, DOLIST, EasyID 和工具栏。而且有一个定量功能的指南。

注意

有关软件中使用的菜单、按钮或窗口的更详细信息，请参阅联机帮助。



数据分析工具栏按钮

加载数据文件
加载选定的数据文件 (.D)，并显示该文件的总离子流图 (TIC)。

加载方法
在目录树中选择要加载的方法文件 (*.M)。

保存方法
保存对当前方法所做的更改。

运行方法
只执行当前方法的 “数据分析”部分。您必须选择要打印的输出文件名称。此输出文件将指定存储文档的文件名称。文档是以打印机可读格式存储的，而不是以用来打印的程序可读格式存储的。

快照
显示在激活快照之前采集的数据。此功能不适于只采集 GC 数据的方式。

打印
打印选定的窗口、总离子流图和谱图或当前方法。

生成 AutoSIM 方法
打开 “AutoSIM 设置”对话框。

编辑选择离子检测参数
在 “选择离子检测组表”中编辑选择离子检测参数。

复制
将选定窗口复制到剪贴板。

复位窗口
将图形窗口按默认位置重新排列。

中止
停止命令或宏。

命令行
在显示或关闭命令行之间切换。

编辑颜色
调整 “数据分析”中各种显示项目的颜色。

缩放 / 恢复图形
将图形窗口的显示最小化或最大化。

关闭屏幕报告
关闭所有打开的屏幕报告。

EasyID
现有定量数据库中，MS 数据的预期保留时间和离子比按逐个化合物更新。

QEdit
数据文件被定量后，即可查看和编辑定量结果。

峰纯度
帮助您检测色谱图中的重叠峰 （多组分峰）（只适用于 GC/MS）。

保留时间锁定
访问用于保留时间锁定任务的 “RTLock 设置”视图。

信噪比
执行信噪比检查，然后显示或打印报告。

CUSTOM TOOL 1
运行用户创建的宏。必须先创建这个宏，然后命名为 CUSTOMTOOL1。有关 “使用和编写宏”及 “数据分析命令”的信息，请参阅联机帮助。

CUSTOM TOOL 2
运行用户创建的宏。必须先创建这个宏，然后命名为 CUSTOMTOOL2。有关“使用和编写宏”及“数据分析命令”的信息，请参阅联机帮助。

CUSTOM TOOL 3
运行用户创建的宏。必须先创建这个宏，然后命名为 CUSTOMTOOL3。有关“使用和编写宏”及“数据分析命令”的信息，请参阅联机帮助。

CUSTOM TOOL 4
运行用户创建的宏。必须先创建这个宏，然后命名为 CUSTOMTOOL4。有关“使用和编写宏”及“数据分析命令”的信息，请参阅联机帮助。

CUSTOM TOOL 5
运行用户创建的宏。必须先创建这个宏，然后命名为 CUSTOMTOOL5。有关“使用和编写宏”及“数据分析命令”的信息，请参阅联机帮助。

隐藏 / 显示导航
显示或隐藏资源管理器面板的切换图标。

绘制色谱图
重新绘制当前数据文件的原始色谱图，无标签或积分标记。

缩放色谱图
用指定的比例因子缩放选定色谱图。

离子色谱图
从当前数据文件的总离子流图 (TIC) 中提取离子并显示提取的离子色谱图 (EIC) （只适用于 GC/MS）。

重叠格式
以相互重叠的方式显示抽取的离子色谱图 （只适用于 GC/MS）。

重叠色谱图
选择多个色谱图 , 以相互层叠形式显示。

自动积分
设法为当前色谱图找到最合适的积分参数，然后对色谱图进行积分。如果当前在方法中设置了 RTE 积分器，则此操作不可用。

积分
使用为当前积分器设定的参数对当前色谱图进行积分。

积分参数
打开一个用于编辑当前积分器的参数或事件的对话框。

扣除
从另一个谱图中扣除一个谱图，并显示扣除之差。

选择谱库
显示“谱库检索参数”对话框，可在此对话框中选择谱库，用于当前选定谱图的 PBM 检索。

谱库检索报告
积分当前的TIC，在当前谱库中搜索与某个峰的匹配标准谱图，并生成报告。

设置定量
填写定量数据资料表，并输入化合物，建立定量数据库。

自动定量
提供创建定量数据库的半自动方式。

编辑化合物
按逐个化合物查看和编辑定量数据库中的信息。

更新校正
在当前定量数据库中添加、删除或更新校正级别。

计算定量报告
定量当前文件并生成定量报告。

生成定量报告
生成已定量文件的定量报告。

打印定量报告
打印定量报告。

定制报告
启动“定制报告”软件。如果该方法无定量数据库，或者未加载数据文件，则可使用默认值。

打印定制报告
通过当前数据文件打印由方法指定的定制报告模板。

“数据分析”选项
打开“选择数据分析选项”对话框。

切换数据分析鼠标操作
在传统操作和新的右键单击菜单选项之间切换鼠标右键单击功能。

显示 / 隐藏堆栈 （变量监视）
选择显示或隐藏堆栈 （变量监视）窗口。

联机帮助
显示 GC/MSD ChemStation 联机帮助。

ChemStation 常用任务

对 MSD 抽气 （启动）

1 抽气之前请确保系统满足以下所有条件：

- ❒ 放空阀已关闭 （旋扭已顺时针拧紧）。
- ❒ 所有其它真空密封垫和接头均已到位并正确紧固。（前侧板镙钉 *不应拧紧*。）
- ❒ MSD 已连接到接地电源。
- ❒ GC/MSD 接口延伸入 GC 柱箱内。
- ❒ GC 进样口和 GC/MSD 接口中安装了已老化的毛细管柱。
- ❒ GC 已打开，但 GC/MSD 接口的加热区、进样口和柱箱处于关闭状态。
- ❒ GC 配有推荐的捕集阱，载气纯度最低为 99.999%，通过气路管道传送至 GC。
- ❒ 如果使用氢气作为载气，则载气流关闭，且前面侧板的指旋螺钉不能拧得太紧。
- ❒ 前级泵排气口必须适当地放空。

警告 **确保 MSD 满足以上所列的全部条件。如果达不到这些条件，则可能会导致人身伤害。**

2 选择**视图 / 调谐和真空控制**。

3 选择**真空 / 抽气**。

4 出现提示时，打开 MSD。

5 用手的压力使侧板与多路连接管接合。

6 加载 “仪器控制” 菜单。

7 轻按侧板，确保密封良好。

前级泵会产生汩汩噪音。此声音会在一分钟内停止。如果此声音继续，表明系统中存在*严重的*漏气现象，问题可能出现在侧板密封垫、接口色谱柱螺帽或放空阀处。

8 与 PC 建立通信后，请单击**确定**。在 10 到 15 分钟，扩散泵变热，或者分子涡轮泵转速上升至正常转速的 80%。分子涡轮泵转速最终至少应达到正常转速的 95%。

小心 如果未满足这些条件，将关闭前级泵。必须关闭 MSD 然后再将其打开。如果 MSD 抽气不正确，请参见联机帮助，了解有关对漏气和其它真空问题进行故障排除的信息。

9 出现提示时，打开 GC/MSD 接口加热器和 GC 柱箱。完成后单击**确定**。软件会打开离子源和质量过滤器（四级杆）加热器。温度设定值存储在当前的自动调谐 (*.u) 文件中。

小心 切勿在载气流启动前打开任何 GC 加热区。在未通载气的情况下加热色谱柱会对色谱柱造成损坏。

10 在消息**可以运行**出现后，需要等待 2 小时，以使 MSD 达到热平衡。

小心 在 MSD 达到热平衡之前采集的数据可能重复性差。

小心 如果使用有毒气体，例如氨，必须拧紧 MSD 侧板螺钉。在达到真空之前拧紧这些螺钉会使密封垫变形，并导致漏气。

放空 （关闭） MSD

1 如果 5975 系列 MSD 有真空规控制器，请在 “调谐和真空控制” 视图中选择**真空 / 打开 / 关闭真空规**。对于 5973 系列 MSD，请确保关闭了外部离子规控制器。

2 关闭真空规。

3 在放空 5973 系列 CI MSD 之前，按 “关闭气体”。这会关闭反应气流，并关闭隔离阀。

警告 **在 5973 CI MSD 上，放空 MSD 时，“关闭气体” 指示灯必须是亮着的。**

4 在 “调谐和真空控制” 视图中，请选择 **真空菜单 / 放空**。按照提供的说明进行操作。

警告 **如果使用氢气作为载气，则在关闭 MSD 电源之前必须停止载气流。如果关闭前级泵，氢气会积聚在 MSD 中，因而有可能发生爆炸。在操作带有氢载气的 MSD 之前，请阅读《氢气安全》手册。**

小心 确保在关闭载气流之前 GC 柱箱和 GC/MSD 接口已冷却。

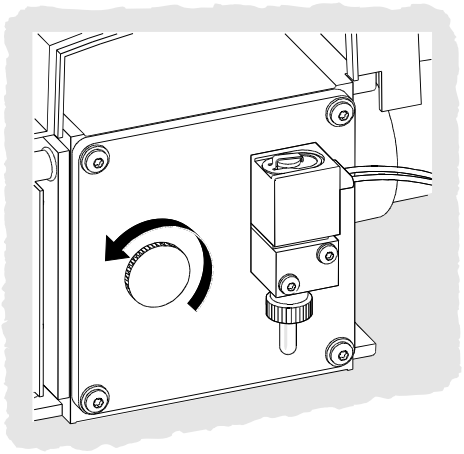
5 出现提示时，关闭 MSD 电源开关。

6 拔下 MSD 电源线。

7 拆下分析仪外壳 （5973 系列）或源视图窗口外壳 （5975 系列）。

8 逆时针旋转放空阀旋钮仅 3/4 圈，或直到听到空气流入分析仪箱时发出的嘶嘶声即可。

5975 放空阀



5973 放空阀

小心 切勿过度旋转旋钮，否则 O 形环会从凹槽中掉出。确保在抽气前重新拧紧旋钮。

警告 **请将分析仪冷却至接近室温，然后再关闭它。**

小心 在处理任何将置入分析仪箱中的部件时，请始终戴上运输工具包中提供的干净手套。

调谐 MSD

为保持 MSD 的最佳性能，应定期调谐 MSD。调谐是一个调整 MSD 参数以使仪器达到一定性能标准的过程。进行调谐的频率取决于您所运行的样品的数量和类型，也取决于系统的总体状况。

注意 **请始终使用相同的 GC 柱箱温度和色谱柱流速调谐 MSD，并且对数据采集使用相同的分析仪温度。**

请将“调谐”报告保存在笔记本中，以便很容易地比较连续的报告。

调谐 MSD

在“仪器控制”视图中：

1 选择**调谐参数**图标（只显示了步骤 2 中列出的头两个菜单）或**视图 / 调谐和真空控制**。

2 根据应用程序所要求的仪器性能，在“调谐”菜单中选择菜单项之一。

- **调谐 MSD**
  在整个扫描范围中获得最高灵敏度。
- **快速调谐**
  调整峰宽、质量分配和丰度，而不改变离子比率。
- **自动调谐 (Atune.U)**
  整个扫描范围的最强响应调谐。
- **低质量自动调谐 (Lomass.U)**
  低质量范围调谐。
- **标准谱图调谐 (Stune.U)**
  在整个扫描范围中，获得标准响应。此选项可能降低灵敏度。

- **DFTPP 调谐 (DFTPP.U)**
  EPA 方法 625 的特定调谐。
- **BFB 调谐 (BFB.U)**
  EPA 方法 624 的特定调谐。
- **调谐向导**
  显示一系列对话框，让您设定丰度比目标和调整调谐标准。这可用于目标调谐。
- **空气与水检查**
  进行标准化测量并生成报告，它是关于系统空气（氮气 *m/z* 28）和水 （*m/z* 18）级别相对于 PFTBA 质量 69 的水平报告。使用此选项可检查泄漏情况。 *m/z* 28 的丰度应该小于 *m/z* 18 的丰度，且两者都应低于 *m/z* 69 的 5%。
- **调谐评价**
  评价当前调谐文件。

3 查看 “调谐”报告。

4 要查看调谐结果历史记录，请选择**文件 / 查看调谐**。

使用手动调谐

使用手动调谐可以交互地将 MSD 参数 （如透镜电压和调谐质量）设置为满足特定分析需要的值。使用手动调谐通常可得到比使用自动调谐更高的灵敏度。

使用手动调谐，您可以分别梯升每个参数，并指定梯升的范围和步长。梯升的结果将显示出来，图上还清楚地标出了参数的最佳值。

在手动调谐中，您可以获取两种类型的数据：轮廓图扫描（绘制调谐质量的丰度和峰形）和谱图扫描 （绘制整个质量范围的响应）。

有关手动调谐的更详细信息，请参阅联机帮助。

采集数据

设置 GC，以与 MSD 联机使用

在 “仪器控制”视图中：

1 在 “仪器”菜单中选择**进样口 / 进样类型。**选择适当的进样源，选中**使用 MS** 复选框。单击**确定**。

2 在 “仪器”菜单中选择**编辑 GC 参数**。

3 单击**辅助通道**。确认正在使用辅助通道 2，加热器已打开并设置为预期的温度，按 “类型”选择了 *MSD*。

4 单击**色谱柱**。确认检测器为 *MSD*，已为出口压力 psi 选择了*真空*。单击**确定**。

使用自动进样器进样

在 “仪器控制”视图中：

1 将装有样品的自动进样器样品瓶放入自动进样器样品盘中。

2 单击 **“运行方法”图标**或选择**方法 / 运行方法**。

3 出现 “开始运行”对话框时，请指定样品信息：

- ❒ 为样品指定唯一数据路径。
- ❒ 为样品指定唯一数据文件名。
- ❒ 在**样品瓶**字段中，输入样品瓶的位置编号。
- ❒ （可选）填写**操作者姓名**、**样品名称**和**其它信息**字段，记录进样情况。
- ❒ 确保已选择了*数据采集*选项。如果要生成方法中指定的任何报告，请选择**数据分析**选项。

4 单击**运行方法**以启动运行。

小心

使用自动进样器时，切*勿*在 GC 上使用**启动**来启动运行。

手动进样

在 “仪器控制” 视图中：

1 在 “仪器” 菜单中选择**进样口 / 进样器类型**。

2 在 “进样口和进样参数” 对话框中，选择**手动**作为进样源。

3 在 GC 键盘上，请按 “预运行”。这会取消省气装置的流量，将进样口流量提至设定值，并关闭吹扫阀 （只适用于无分流进样）。

4 选择**方法 / 运行方法**。

5 出现 “开始运行” 对话框时，请指定如下所述的样品信息：

- ❒ 为样品指定唯一数据路径。
- ❒ 为样品指定唯一数据文件名。
- ❒ （可选）填写**操作者姓名**、**样品名称**和**其它信息**字段，以记录进样。
- ❒ 确保已选择了*数据采集*选项。
- ❒ （可选）如果要生成方法中指定的任何 “数据分析” 报告，请选择**数据分析**选项。

6 单击**运行方法**以启动运行。如果温度是稳定的，则会出现 “准备进样” 对话框。否则会显示**等待 GC 准备就绪**的消息。

7 在 GC 温度稳定时 （6890 GC — GC 上的 “预运行” 指示灯是稳定的，6850 GC — “未准备就绪” 指示灯关闭），请注入样品并按 GC 上的 “启动”。

小心 GC 准备就绪之前切勿进样。这会导致不一致的结果。

编辑整个方法

在“仪器控制”视图中，请选择**方法 / 编辑整个方法**。“编辑方法”对话框允许选择编辑方法的某个部分：

- 方法信息
- “仪器 / 采集”将显示所有相关的 GC 和 MS 对话框以便您输入。
- 数据分析

当单击**确定**时，将有序地显示所选部分地对话框以便编辑。

当提示保存该方法时，如果愿意可为该方法输入新的名称。如果定制报告模板已被指定为报告类型，将提示您是否保存带有数据文件的已生成报告的副本。

设置序列

通过“样本日志表”设置序列。“样本日志表”每行包含样本（ALS 的样品瓶）分析的信息。

1 如果“样本日志表”还没打开，请选择**序列 / 编辑序列**或单击仪器控制中的**编辑序列**按钮。

2 单击表中的空白行。然后在对话框中单击标为**类型**的箭头，并选择将要运行的样本类型。

3 使用制表键或鼠标移到**样品瓶**对话框，并输入样品瓶编号。

4 请移到**方法**对话框，并输入当前样本使用的方法名。（若查询方法系列表，请单击该区域中的 **?** 按钮。）

5 提供其**数据文件**名，一个**样本**名，**备注** 和**期望的条码**。

6 移到与样本有关的其它区域

注意

显示的区域依赖于所选样本的**类型**。

7 完成后，请单击**确定**。

要将另一序列的内容追加到当前列，请选择**序列 / 附加序列选项 ...** 并选择**追加序列**。

分析 MS 数据

您可以在 **“导航”面板**加载数据文件，或在 “数据分析”视图中选择**加载数据文件**。

加载数据文件

在 “数据分析”中加载数据文件：

1 选择**加载数据文件**图标，或在“文件”菜单中选择**加载数据文件**。

2 选择数据文件（在文件名称上双击鼠标或键入 一个文件名，然后单击**确定**）。该数据文件的色谱图被加载，并显示在窗口 [2] 中。

小心

要执行本部分的任何任务，必须加载数据文件。

对色谱图进行积分

1 如果当前未选择您要使用的积分器，则打开“色谱图”菜单，单击**选择积分器**。选择一个积分器后单击 **确定**。

2 选择**色谱图 / 积分**。

3 （可选）选择**色谱图 / 积分结果**。将在屏幕上显示一个表格形式的结果报告。查看结果后，请单击**关闭**。

选择谱图

注意

如果在窗口 [1] 或 [2] 右键单击鼠标，请使用**切换数据分析鼠标操作**按钮在右键单击模式之间切换。

在色谱图上所关注的时间点上双击鼠标*右*键。谱图将显示在窗口 [1] 中。

放大

1 在色谱图或谱图中，将鼠标指针定位在要扩展区域的一角。

2 按住鼠标*左*键的同时拖动鼠标以选择您要扩展的区域。

3 释放鼠标键。扩展选定的区域以便填充现有窗口。

缩小

1 在缩放窗口的任一位置定位鼠标。

2 双击鼠标*左*键。

平均谱图

1 将鼠标指针定位在色谱图上要取平均值的范围的起始时间处。
2 按鼠标*右*键的同时将鼠标拖动到要平均的区域末端。
3 释放鼠标右键。对选定范围的谱图取平均值，平均谱图显示在窗口 [1] 中。

两个谱图相加

1 选择一个谱图 （在色谱图中双击鼠标*右*键）。
2 选择第二个谱图 （在色谱图中双击鼠标*右*键）。
3 选择**谱图 / 相加**。两个谱图相加到一起，所得到的谱图谱图显示在窗口 [1] 中。

两个谱图相减

1 选择一个谱图 （在色谱图中双击鼠标*右*键）。
2 选择要扣除的谱图 （在色谱图中双击鼠标*右*键）。
3 选择**谱图 / 扣除**。

从步骤 1 选择的谱图中扣除在步骤 2 中选择的谱图，所得到的结果谱图显示在窗口 [1] 中。

扣除背景谱图

1 选择一个谱图或要从数据文件中扣除谱图的平均范围。
2 选择**文件 / 扣除背景 (BSB)**。系统会执行以下任务：

- 从当前数据文件的每个扫描中扣除选定的谱图。
- 扣除了背景的数据存储在与数据文件相同的目录中的 BSB 子目录中。
- 扣除的数据文件成为当前数据文件，并显示在窗口 [2] 中。

打开 / 关闭扩展菜单

在“数据分析”视图中，请选择**选项 / 显示扩展菜单**。现有的下拉列表将包括附加菜单项。

显示宏菜单

在“数据分析”视图中，请选择**选项 / 显示宏菜单**。菜单选项栏将显示**宏菜单**选项。

打开 “多个数据文件”视图

在“数据分析”视图中，请选择**查看 / 分析多个数据文件 ..** 可以同时查看 9 个以上的色谱图。要返回到标准的“数据分析”视图，请选择**查看 / 返回到数据分析**。

打开 “多个谱图”视图

在“数据分析”视图中，请选择**查看 / 分析多个谱图 ..** 允许同时查看多个谱图。要返回到标准的“数据分析”视图，请选择**查看 / 返回到数据分析**。

使用谱库

选择谱库

1 在 “数据分析”中，选择**谱图 / 选择谱库**。

2 在**谱库检索参数**对话框的第一行中输入库名称。

最多可输入两个附加检索谱库。

在这些附加谱库中的检索取决于所找到的达到指定匹配质量的化合物。

对峰进行积分和检索

使用下面的步骤对总离子流图进行积分，并自动为每个检测到的峰生成谱库检索报告。

1 在“数据分析”中，加载数据文件。会显示总离子流图。

2 选择**谱图 / 谱库检索报告**。

3 出现**谱库检索报告选项**对话框时，选择您想要的谱库检索报告选项：

- 选择**摘要**或**详细**，以确定报告的格式。
- 选择一个或多个目标 （**屏幕**、**打印机**和**文件**）。
- 选择**积分参数文件** （将此字段保留为空白以使用 GC/MSD ChemStation 积分器自动积分）
- 从每个峰选择要使用的谱图 （**顶点**、**顶点 - 峰起点**、**顶点 - 某个时间的背景或者峰平均**）。

4 单击**确定**，启动检索。

对色谱图进行积分，搜索每个峰的谱图。积分结果显示在屏幕上。谱库检索报告将发送至步骤 3 中选定的目标。

5 选择**色谱图 / 积分结果**，以查看表格形式的积分结果。

检索单个谱图

1 在 “数据分析”中，加载数据文件。

2 选择**谱图**。

3 在包含谱图的窗口中双击鼠标右键。

注意

如果右键单击窗口 [1] 或 [2] 会显示菜单，请使用**切换数据分析鼠标操作**按钮在右键单击模式之间切换。

完成搜索后，检索结果将显示在屏幕上。屏幕内容包括未知谱图、从匹配列表中选择的参比谱图，如果可能，还包括参比化合物的化学结构。

4 查看其它谱图数据：

- 在匹配项列表中单击另一个化合物，以显示一个不同的参比谱图。
- 选择**差异**复选框，以显示未知谱图与参比谱图之间的差异。

5 查看其它信息：

- 单击**统计**，以显示列表中找到的每个匹配项的质量的相关信息。
- 单击**文本**，以查看存储在谱库中的当前参比谱图的标题信息。

6 单击**打印**，以打印显示谱图的副本。

7 单击**完成**，从屏幕上清除谱库检索结果。

使用保留时间锁定

保留时间锁定 (RTL) 是评估某个特定方法（色谱柱、流量设定值、柱箱温度）特性的程序，这样，色谱柱的任何改变对保留时间的影响通常会被忽略。此程序包括收集化合物（其预期保留时间已知）在不同进样口压力下的数据，此压力在当前方法设定值上下浮动

（–20%, –10%，额定， +10%, +20%）。然后评估五次合成运行，生成压力 / 保留时间曲线，以标出特定仪器的特性。从曲线上，可计算出导致锁定化合物在预期时间洗脱的预测压力，然后将该压力存储起来，以便于方法在该压力下运行。

锁定 MS 方法

1 在“仪器”控制中，加载您要锁定的方法。如有必要，编辑方法参数。

2 对于 ALS 进样，将样品瓶放在位置 1。

3 选择**方法 / 采集保留时间锁定校正数据**。这会启动保留时间锁定校正文件的收集。

4 为校正范围（–20%、–10%、+10% 和 +20%）评估额定压力，并自动进行五次运行。系统将会提示您进行五次运行，如果有任何以前的校正数据，系统也会关于这点向您提出警告。五个数据文件将存储在方法目录中名为 RTLOCK 的文件夹下，数据文件名为 RTLOCK1 - RTLOCK5。

5 数据收集完成后，将启动“数据分析”的一个新会话，并加载额定运行 (RTLOCK3.D)。选择您要用于保留时间锁定校正计算的峰（单击鼠标右键并拖动鼠标）。

6 将显示选定峰的谱图。单击**是**，软件会在剩余四次运行中自动定位锁定化合物的峰。现在，软件将执行谱图比较和曲线拟合确定。然后会显示五个选定的峰。

7 系统将显示曲线方程 （基于保留时间与压力值），并询问您是否继续。单击**是**。

8 接下来，输入您要使用的锁定保留时间，然后单击**确定**。

9 单击**是**，将锁定压力信息保存至方法。输入您要使用的锁定化合物名称，然后单击**确定**。

10 系统将提供删除校正数据文件 (RTLOCK1.D - RTLOCK5.D) 的选项。选择**是**或**否**。方法将立即被锁定。

不论何时将锁定的方法加载至“仪器控制”，标题栏都会指示方法已锁定，并指出锁定所用的化合物。压力（只适用于联机的仪器）将被设置为锁定的压力。

注意 **运行锁定方法时，即使您使用 GC 键盘或从“仪器控制”对压力值进行了更改，压力值也会恢复为锁定压力值。**

维护计划

在系统的硬件手册中介绍了详细的维护任务。进行系统维护的频率随系统状况的不同而不同。保留维护记录。

每天

- ❒ 检查，如果需要，更换隔垫。
- ❒ 检查进样口衬管是否紧密。
- ❒ 检查色谱柱螺帽是否紧密。

每星期

- ❒ 检查前级泵液位。
- ❒ 更换进样口衬管和 O 形环。

每个月

- ❒ 清洗分流 / 无分流进样口排气管捕集阱。
- ❒ 检查泄漏 （进样口、色谱柱连接）。

每 3 个月

- ❒ 更换气瓶 （在压力低于 500 psig 时）。

每 6 个月

- ❒ 更换前级泵液。
- ❒ 检查，如果需要，重新向校正样品瓶注入液体。

每年

- ❒ 检查，如果需要，更换扩散泵液。
- ❒ 修理或更换 GC 中的内部或外部捕集阱及化学过滤器。

按需要进行

- ❒ 调谐 MSD。
- ❒ 清洁离子源。
- ❒ 更换载气捕集阱。
- ❒ 更换老化部件 （EM 热丝等）。
- ❒ 更换色谱柱。
- ❒ 润滑密封垫。

安全警告

警告

除非 MSD 提供的文件中有特别的说明，否则切勿在 MSD 处于打开状态或连接到电源时进行维护。

即使关闭了 MSD， GC/MSD 接口也可能会打开且处于危险的高温状态。 MSD 关闭后， GC/MSD 接口的冷却非常慢。在进行操作之前，请确保全部部件都已冷却。

在 GC 背后操作时请小心。在冷却循环期间， GC 将排放可能烫伤操作人员的高温废气。

如果正在分析有毒的化学物质或使用有毒溶剂，请使用一条软管将前级泵废气排出实验室外。请注意：带有标准前级泵的集油器只能停止前级泵油的流动，它不能捕集或过滤掉有毒的化学物质。

更换泵液时，请佩戴适当的防化学腐蚀的手套以及护目镜。避免接触到这些液体。

进样口、检测器和阀箱周围的隔热材料以及隔热罩的材料均是耐火陶瓷纤维。避免吸入耐火陶瓷纤维微粒。保持工作区域通风，穿着长袖服装，配戴手套、护目镜和一次性防尘雾口罩。将隔热材料放入密封的塑料袋中。处理耐火陶瓷纤维材料后使用中性肥皂和凉水洗手。

操作技巧

- ❒ *定期*备份数据和方法。
- ❒ 确保使用的调谐文件适合样品。
- ❒ 将“调谐”报告保存在笔记本中，以备将来参考。
- ❒ 按照 GC 和 MSD 硬件文档中的维护计划中的说明进行系统维护。保留所有执行的维护记录。
- ❒ 在放空 MSD 时，利用冷却的 GC 进行维护，如更换进样口衬管、隔垫等。
- ❒ 抽真空后，在调谐或采集数据之前，要等待*至少 2 个小时*，才能使 MSD 达到热平衡。
- ❒ 最佳灵敏度通常在色谱柱流速等于或小于 1.2 毫升 / 分钟时出现。
- ❒ 在进样体积大于 1 微升时，请使用脉冲无分流模式，并提高初始柱箱温度 10 至 20 ℃。
- ❒ 对于**无分流**进样，脉冲无分流模式能将更多定量样品传输至色谱柱。通常，脉冲压力是初始进样口压力的两倍。
- ❒ 如果选择**恒定流量模式**，则在大多数情况下将会供最有效的分离。
- ❒ 对于新色谱柱，在最初的几次柱箱温度循环之后，要检查色谱柱螺帽是否依然紧固。
- ❒ 请使用 6890 GC 键盘上的［配置状态］键来设置对您来说最为重要的三个显示项目（**剩余时间**、**柱箱温度**等）。不管哪个 GC/MSD ChemStation 视图处于顶部，这些项目始终可见。
- ❒ 冲洗并重新填充自动进样器清洗瓶。不要向已有部分溶剂的样品瓶添加溶剂。

- 将下表作为使用 “选择离子检测”和 / 或 “扫描”采集模式的指导。

任务	模式
分析未知组分的混合物。	扫描，或 扫描和选择离子检测
分析未知浓度、已知组分的混合物（定量）。	扫描，或 选择离子检测，或 扫描和选择离子检测
在混合物中鉴别一些低浓度水平的已知化合物的存在。	选择离子检测

- 在选择 “选择离子检测”的质量时，请使用在表格形式的报告中打印的精确质量，而不要使用谱图显示中标注的额定质量。这会提供更准确的数据。
- 在进行 “选择离子检测”分析时，请使用低分离度模式，除非您想要确定原子分离的质量比率。低分离度会提供最高的灵敏度和最大的重复性。
- 选择能够产生较好谱库检索结果的最小扫描范围。这样会在一个色谱峰中有更多的谱图数据，并且可更好地进行定量。

错误消息和故障排除

错误消息

有时，MSD 中的问题会导致错误消息出现在 GC/MSD ChemStation 软件中。有些错误消息仅在调谐过程中出现。其它消息可能出现在调谐或仪器控制中。

有时，只显示编号，而不出现消息。此编号可代表一个或更多错误消息。

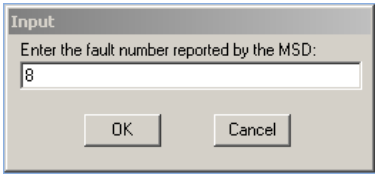
将编号转译为错误消息：

1 记下编号。

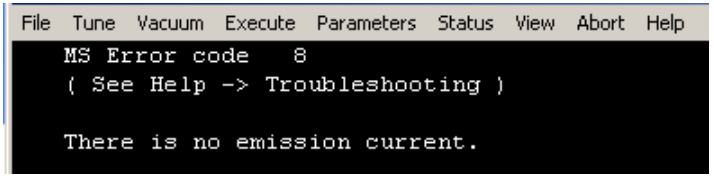
2 在“仪器控制”中，选择**视图 / 调谐和真空控制**。

3 选择**状态 / MS 错误编码**。

4 在给出的框中键入错误编号，然后单击**确定**。 .



将显示对应的错误消息。



故障排除技巧

MSD LAN 错误

MSD 已启动，但状态闪烁 “未找到服务器！请检查 LAN 连接”

这在启动并初始化 MSD 时很常见。这意味着 GC/MSD ChemStation 还未与 MSD 建立起通信。如果启动真空后，闪烁依然继续，可能的原因是：

- 临时的电源故障中断通信。
- MSD 与 GC/MSD ChemStation 和 / 或 Agilent Bootp service 和 / 或交换机 / 集线器之间的连线故障。
- 在 LAN 中的 Agilent Bootp service 中， MSD 的 MAC 和 IP 地址配置不正确。

基线升高

- 色谱柱漏气
- 其它污染

前级泵或多管真空系统压力过高

- 色谱柱流量过大
- 漏气
- 扩散泵液面过低
- 扩散泵液被污染
- 前级泵油位过低
- 前级泵油被污染
- 前级软管收缩（这会导致真空多管压力过高而前级泵压力过低）

质谱图中背景较高

- 漏气
- 前级泵或真空多管压力过高
- 其它污染

m/z 为 18、 28、 32 和 44 时的离子

- 检测器最近进行过放空操作 （残余空气和水）
- 漏气

同位素缺失或同位素比值有误

- 不正确的调谐
- 离子源变脏
- 背景较高
- 电子倍增器电压过高
- 推斥极电压过高
- 扫描速度太高 （扫描模式）
- 停留时间太短 （选择离子检测模式）
- 峰太宽或太窄
- 推斥极和离子聚焦极相斥

无峰

- 样品浓度有误
- 不存在分析物
- 缺少注射器或注射器未正确安装 （只适用于 ALS）
- 空的样品瓶
- 分流模式进样而非无分流模式进样

峰拖尾

- 样品路径中存在活性点
- 注射过多
- 进样口温度过低
- 色谱柱流量过低
- GC/MSD 接口或离子源温度过低

平峰顶

- 溶剂延迟时间过短
- 显示比例有误
- 注射过多
- 电子倍增器电压过高

分顶峰

- 进样技术错误
- 进样量过多

峰宽不一致

- 不正确的调谐
- 校准瓶中无全氟三丁胺 （PFTBA）
- 校准阀故障
- 离子源变脏
- 电子倍增器破旧
- MSD 无足够时间达到热平衡
- 实验室温度变化较大

重复性不佳

- 注射器针头变脏
- 进样口漏气
- 进样口衬管与注射器大小不匹配
- 色谱柱连接松开
- 压力、色谱柱流量和温度的变化
- 离子源变脏
- 分析仪中的连接松开
- 地线

灵敏度不佳

- 不正确的调谐
- 调谐文件与分析类型不匹配
- 温度有误
- 样品浓度有误
- 进样口漏气
- 分流比有误
- 无分流模式下的吹扫时间太短
- MSD 中压力过大
- 离子源变脏
- 漏气
- 检测器目前工作不正常
- 热丝运行情况不佳
- 质量过滤器极性有误

保留时间 （RT）偏移

- 色谱柱已缩短 （保留时间更短）
- 色谱柱变旧 （保留时间更短）
- 样品路径中存在活性点 （保留时间更长）

- 色谱柱流量已降低 （保留时间更长）
- 进样口漏气 （保留时间更长）
- 柱箱初始温度发生变化 （升高 = 保留时间更短，
  降低 = 保留时间更长）

有关更详细信息，请参阅联机帮助的 “MSD 故障排除”部分。

2 了解定量

定量 56
本章内容 56
简介 56
在 GC/MSD ChemStation 中定量如何工作? 56
定量数据库 59
简介 59
我将如何手动建立定量数据库? 61
“自动定量设置”如何工作? 66
指南 – 使用自动定量设置 67
步骤: 使用 “自动定量设置”以创建定量数据库 68

定量

本章内容

本章将指导您完成创建定量数据库的基本步骤。这些步骤是熟悉使用本软件的起点。

如果有兴趣，请在本章结束时尝试本“指南”中的这些步骤，然后尝试根据自己的数据文件创建定量数据库。有关这些功能以及它们如何工作的更多信息，请使用联机帮助。

简介

“定量”的作用是什么？

“定量”可标识样品中化合物的多少。

“定量”在何时进行？

“定量”在分析样品的最后阶段进行 （标识化合物之后）。

如何进行“定量”？

“定量”是通过将来自未知量化合物（从运行中抽取的数据）的响应与已测定化合物 （存储在定量数据库中）的响应进行比较来进行的。

定量数据库将在本文档稍后部分讨论。

在 GC/MSD ChemStation 中定量如何工作？

下面将用非常通用的术语来描述 ChemStation 如何确定样品中化合物的含量。它是一个分为两部分的过程。

第一部分 — 数据采集

本过程的第一部分包含*数据采集*，下面将对其进行简要说明。

在将未知样品放入 GC/MSD 时，一般说来，此样品将被加热、加压、分离为单个组分，最后将通过 ChemStation 中的检测器。所有操作的执行取决于您指定的方法。

检测器将查看每种化合物的唯一谱图，然后 ChemStation 将此谱图与已知的谱图（存储在与方法相关的谱库里）进行比较。如果存在匹配项，则 ChemStation 将报告此匹配项。

因此，如果在样品中找到的某种化合物的谱图与存储在与方法相关谱库中的 xxx 的谱图相匹配，则 ChemStation 可以报告在样品中找到了 xxx。

创建方法的数据采集部分是高度专业化的过程，已超出本文档讨论的范围。有关创建方法的详细信息，请参考联机帮助。

在本文档结尾的指南中，我们将采用默认的方法、演示数据文件以及随 ChemStation 提供的演示谱库来说明自动定量设置将如何工作。

第二部分 — 数据定量

本过程的第二部分包含查找样品中存在化合物的含量。这是本过程的*数据定量*部分，将在下面简要说明，并在位于第 67 页的指南 — 使用自动定量设置中详细阐述。

要确定样品中化合物的含量， ChemStation 必须能够将找到的 xxx 的未知含量与 xxx 的已知含量进行比较，以便求出比值，并提供答案。

此处开始介绍定量数据库。

谱库存储已知化合物谱图的同时，定量数据库将存储这些化合物谱图及其附加详细信息，例如：

- 化合物在特定含量时将如何响应（例如， 10 亿分之 10）
- 化合物的目标离子
- 目标离子的限定离子

因此，在软件通过与谱库进行比较来*标识*化合物后，将未知样品的仪器响应与定量数据库中的响应进行比较，就可以进一步定义其*含量*。

例如，如果定量数据库中条目的值为 10 ppb，而样品中发现的量是上述量的两倍，则样品的值必定是 20 ppb。

注意

这是对此过程较为简单的描述。但是，本讨论仅仅旨在对数据采集和定量的基本概念进行说明，而不是对有关其如何工作的具体细节进行说明。

有关设置定量数据库的信息，请参见位于第 67 页的指南 — 使用自动定量设置 。

定量数据库

简介

定量数据库的含义是什么？

定量数据库将列出您要查找的每一化合物的重要细节。

定量数据库中需要哪种类型的数据？

对于需要定量的每种化合物，定量数据库应包括：

- 一个用来标识要查找的化合物的条目，此条目包括以下项：
  - 保留时间
  - 定量参数
  - 标识选择标准
  - 计算限定离子比的方法
  - 相对响应的可接受范围
  - 对化合物校正数据应用数学方法
  - 用于校正曲线的数据点
- 标识要查找的化合物中目标离子（通常为基峰离子）的条目
- 进一步限定化合物存在的两个或多个离子的条目。（例如，这些离子总是随化合物的峰离子一起出现，并且两种类型的离子间始终保持相同的比例。）
- 将要使用的所有内标

这似乎很难做到，但“自动定量设置”能够为您自动标识这些离子。有关“自动定量设置”如何工作的详细信息，请参阅位于第 64 页的如何使用“自动定量”建立定量数据库？。

定量数据库的容量有多大?

要定量单个化合物，定量数据库至少要包含三个条目：

- 化合物的基峰离子
- 限定此峰离子存在的其它两个离子

许多用户选择的其它可选条目是内标。

根据要定量的目标化合物数目和校正曲线中定义的数据点数，可以扩展定量数据库的大小。

我将如何创建定量数据库?

有以下两种方法可将化合物添加到定量数据库中：

- 手动方法
- 使用 “自动定量设置”的半自动方法

上述两种方法将在下面进行概述。

我将如何手动建立定量数据库？

本节是关于手动建立定量数据库所需步骤的概述。

手动建立定量数据库要求用户从视觉上检查色谱图，并分别选择每种化合物、目标离子及所需的限定离子，然后对其进行命名并保存在定量数据库中。（该操作在位于第 62 页的如何手动建立定量数据库的概述 的步骤 2 至 8中进行了描述。）

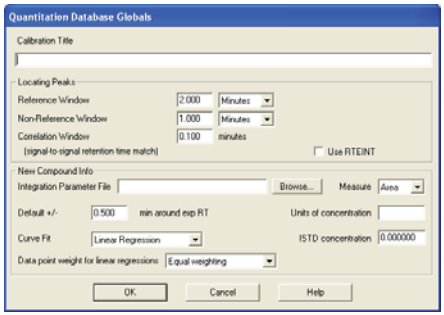
讨论手动建立定量数据库之后，将有一节内容专门讨论如何使用“自动定量设置”建立定量数据库。“自动定量设置”是一半自动过程，在此过程中，软件将检查色谱图，并根据离子的丰度和指定的谱库来选择化合物、目标离子和限定离子。

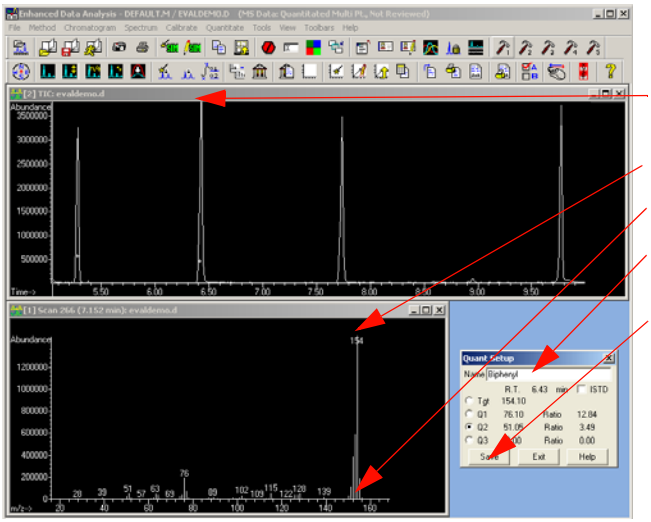
再次声明，以下两节仅包括概述信息。关于使用“自动定量设置”建立定量数据库的详细指导，请参阅位于第 67 页的指南 — 使用自动定量设置。

如何手动建立定量数据库的概述

要手动设置定量数据库，需要完成以下常规操作。

1 调用包含要校正的化合物的测定标准的数据文件，并对“定量全局设置”页中列出的定量数据库的所有化合物输入公用信息，输入操作完成后，单击**确定**。（选择**校正 / 设置定量 ...** 以访问**定量数据库全局设置**页）。





2 手动检查由测定样品数据文件生成的色谱图。

3 通过单击色谱图中化合物的峰来分别选择每种化合物。

4 在显示的谱图中选择目标离子。

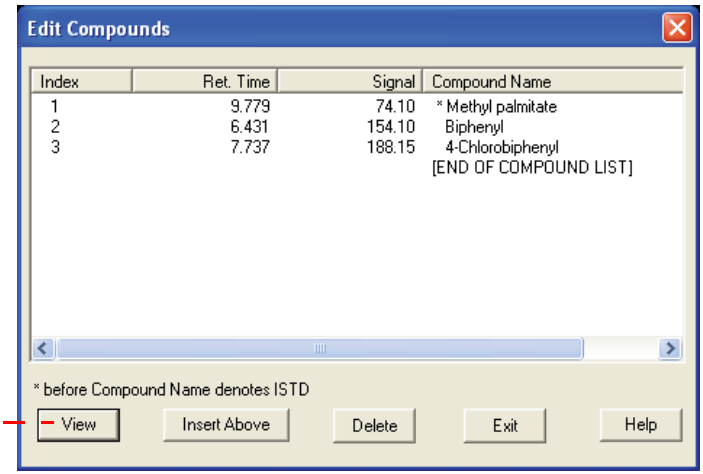
5 选择此化合物的限定离子。

6 给化合物命名，如果此化合物是内标，则选中该复选框以将其标识。

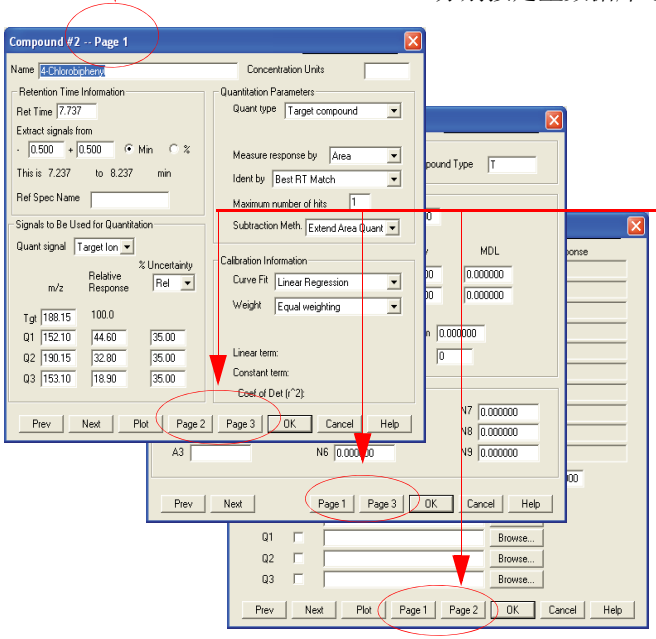
7 将此化合物的谱图保存至定量数据库中。

8 对希望添加到定量数据库的每种化合物重复步骤 2 至 7。

9 如果已添加完需要的所有化合物，则选择**校正 / 编辑化合物 ..** 以查看定量数据库中所有条目的完整列表 （位于**编辑化合物**屏幕中）。



10 在**编辑化合物**屏幕中，您可以选择任一化合物，然后单击**查看**以显示为此化合物保存的第一页数据。每个化合物具有三页信息，分别按定量数据库记录的第一页、第二页和第三页形式保存。



使用页码按钮在三页间切换。

谱图信息和在 “全局设置”屏幕中输入的信息将传输到这些页面中。

要完成此过程，请为定量数据库的每个条目 *手动* 更新单个化合物屏幕 （第一、二、三页）。

如何使用 “自动定量” 建立定量数据库？

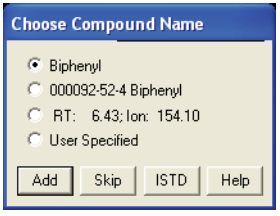
在手动过程中，必须手动检查色谱图，并对希望加入到定量数据库的每个化合物和离子分别进行选择、命名并保存。但是，“自动定量设置” 是一半自动过程，在此过程中，软件将检查数据文件，并根据离子的丰度和指定的谱库来自动标识化合物、目标离子和限定离子。

如何使用 “自动定量” 建立定量数据库的概述

要使用 “自动定量设置” 创建定量数据库，您需要完成以下常规步骤。

1 第一步与手动建立定量数据库的第一步相同。有关详细信息，请参阅位于第 62 页的如何手动建立定量数据库的概述 。

2 手动过程的步骤 2 至 8 包含手动选择化合物和离子。但是，如果使用 “自动定量”，则上述步骤是自动进行的，如在此所描述的那样。完成**数据库全局设置**屏幕的操作之后，单击**确定**（在步骤 1 中），软件将开始自动查找数据文件中有意义的峰。对于找到的每个峰，软件将数据与指定谱库进行比较，然后将化合物显示在类似于下图的屏幕中。



在此屏幕中：

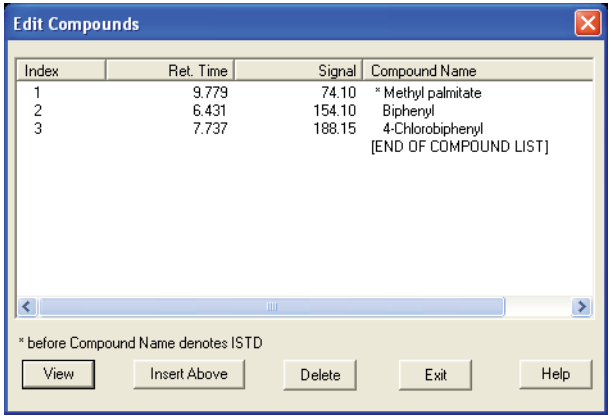
添加 将此*化合物*及其*目标离子*和*三个限定离子*添加至定量数据库中。

跳过 使软件显示在数据文件中找到的下一个化合物。

内标 将此化合物添加至定量数据库中，并将其标识为内标。

注意 **内标必须在化合物之前指定，并在条目列表中用星号指示。**

3 在数据文件中找到的所有化合物显示出来之后，系统将提示用户**是否希望 “立即定量”？**选择**是**将显示校正屏幕，随后出现**编辑化合物屏幕**，在此屏幕中可以查看已经完成的定量数据库。（此过程与手动过程的步骤 9 等效。）



在**编辑化合物**屏幕中，可以选择任一化合物并单击**查看**，以显示为此化合物保存的数据的第一页，这与手动过程步骤 10 中描述的完全一样。

“自动定量设置”如何工作？

自动定量设置 使用指定的谱库来标识数据文件中的化合物，并且根据化合物中离子的丰度来为每种化合物选择目标离子和限定离子。如果您确认此选择，则“自动定量设置”将自动完成定量数据库中必需条目的操作。

先决条件： 为了使用“自动定量设置”，必须具备包含目标化合物的谱库，并且校正标准不能包含共洗脱化合物。

指南 — 使用自动定量设置

本指南将指导您完成使用“自动定量设置”以创建定量数据库的所有步骤。本练习旨在说明通过使用“自动定量设置”可以快速地创建和使用定量数据库。完成本练习可能需要花费 5 分钟时间。

练习期间，您将创建一个包含定量数据库的方法，该方法可以识别和定量联苯、一氯联苯和棕榈酸甲酯。

要完成此操作，需要执行如下步骤：

1. 调用随 ChemStation 提供的默认方法 **DEFAULT.M**。
2. 调用随 ChemStation 提供的演示数据文件 **EVALDEMO.D**。
3. 使用随 ChemStation 提供的演示谱库 **DEMO.L**。
4. 使用 “自动定量设置”以创建包含下列化合物的定量数据库：
   - 十二烷
   - 联苯
   - 一氯联苯
   - 棕榈酸甲酯

所得的方法和定量数据库将可以识别联苯、一氯联苯和棕榈酸甲酯，并对其进行定量。

步骤：使用 “自动定量设置”以创建定量数据库

1 先复制文件 **DEFAULT.M** 和 **EVALDEMO.D**，然后在本指南中使用这些文件。

2 在*数据分析*中，调用以下两个文件：

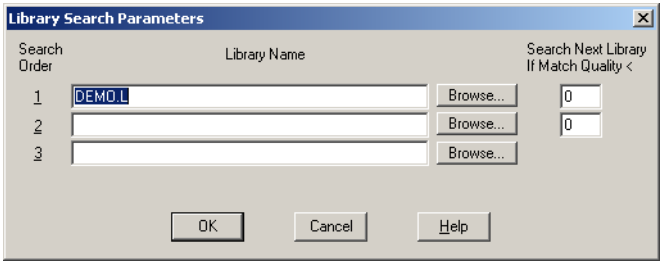
演示方法 **C:\MSDCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M**

演示数据文件 **C:\MSDCHEM\1\DATA\EVALDEMO.D**

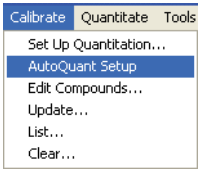
在执行此步骤以创建自己的定量数据库时，本数据文件将从校正样品运行中取得。

3 在**谱图 / 选择谱库**下或者单击图标：

选择 **DEMO.L**。



4 选择**校正 / 自动定量设置**或者单击图标。



5 出现**定量数据库全局设置**对话框后，请注意其中显示的默认信息（此信息即是在前面看到的信息）。可以对方法作出必需的修改。

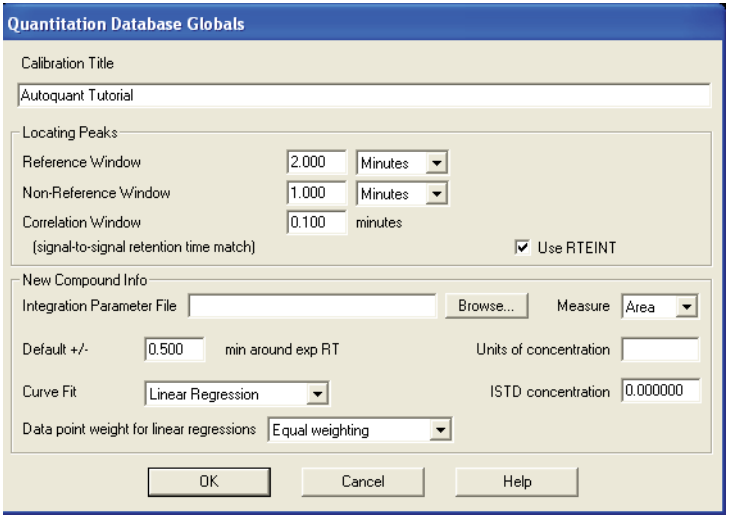
本屏幕称为“全局设置”，原因是此处出现的信息是全部化合物的公用信息，而且，对于添加至定量数据库的每种化合物而言，这些信息是自动填充的。

6 对于本指南，在出现**定量数据库全局设置**对话框时，请输入以下信息：

a 在**校正标题**字段中，键入 **AutoQuant Tutorial**。此行将显示在每个定量报告的标题中。

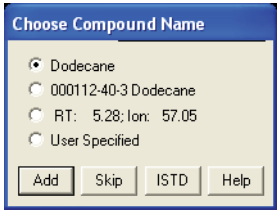
b 选中**使用 RTEINT** 复选框以使用 RTE 积分器。

c 单击**确定**。



单击**确定**后，软件将开始在数据文件中查询有意义的峰。当找到第一个峰时，软件将此峰与指定谱库进行比较（在步骤 3 中），然后显示在谱库中找到的第一个化合物的名称。当屏幕显示每个化合物时，您可以确定对此化合物所进行的操作。

7 这本例中，第一个找到的化合物是十二烷。对此化合物，可以进行三种操作：



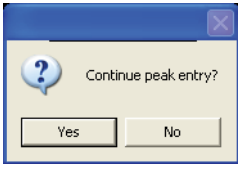
添加 将此*化合物*及其*目标离子*和*三个限定离子*添加至定量数据库中。

跳过 使软件显示在数据文件中找到的下一个化合物。

内标 将此化合物添加至定量数据库中，并将其标识为内标。

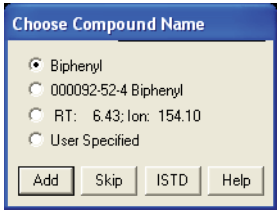
显示十二烷的**选择化合物名称**对话框时，请单击**跳过**。为了演示目的，我们现在跳过此化合物。稍后，我们将返回到此过程，然后将此化合物添加到定量数据库中。

出现**是否继续峰条目？**对话框时，请单击**是。**

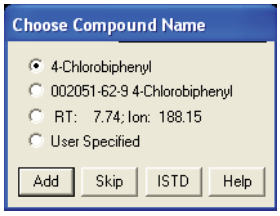


（如果在此处单击**否**，则将出现**是否立即定量？** 对话框，如步骤 11 所示。）

8 下一个出现的是联苯 （因为此样品中，联苯在十二烷之后洗脱）。保留默认名称，并单击**添加**以此化合物添加至定量数据库中。

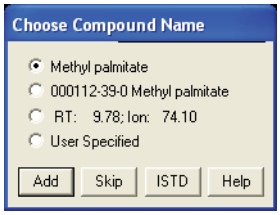


9 下一个出现的是 4- 氯联苯。保留默认名称，并单击**添加**。



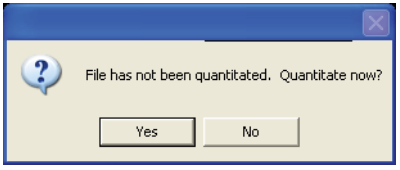
10 下一个出现的是棕榈酸甲酯。

要将此化合物指定为内标，请单击**内标**。为了演示目的，我们将此化合物标识为内标。内标是将要注入到每个要测试的样品的化合物，作为标准化因子和比较的依据。



单击**内标**可将此化合物添加至定量数据库中，并将其定位在*定量数据库中化合物列表的顶部*，这一点非常重要，因为内标必须在所有化合物之前指定，在定量数据库中所有这些化合物是相对于内标而定量的。

11 当软件提示您**是否立即定量？**请单击**是**。



文件定量后，将出现**更新校正**对话框。

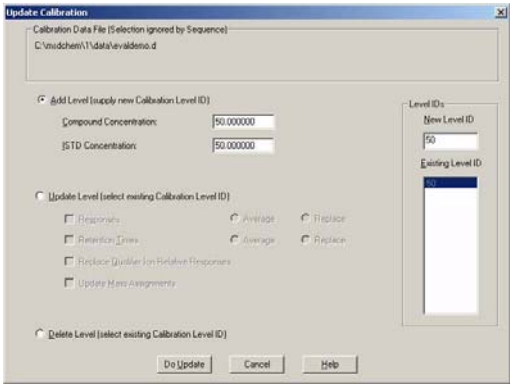
12 请选择**增加级别**（提供新的校正 ID）并输入下项：

新级别 ID = 50
这仅为一个说明性标签。

化合物浓度 = 50
化合物具备的浓度。

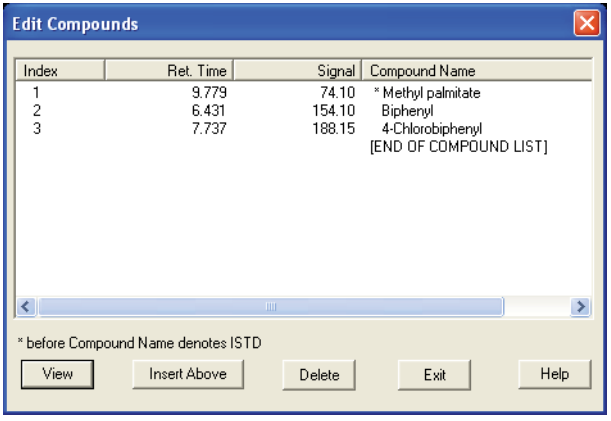
内标浓度 = 50
内标具备的浓度。

然后单击**执行更新**。



13 将出现**编辑化合物** 框，在此框中显示定量数据库中化合物的完整列表。注意以下内容：

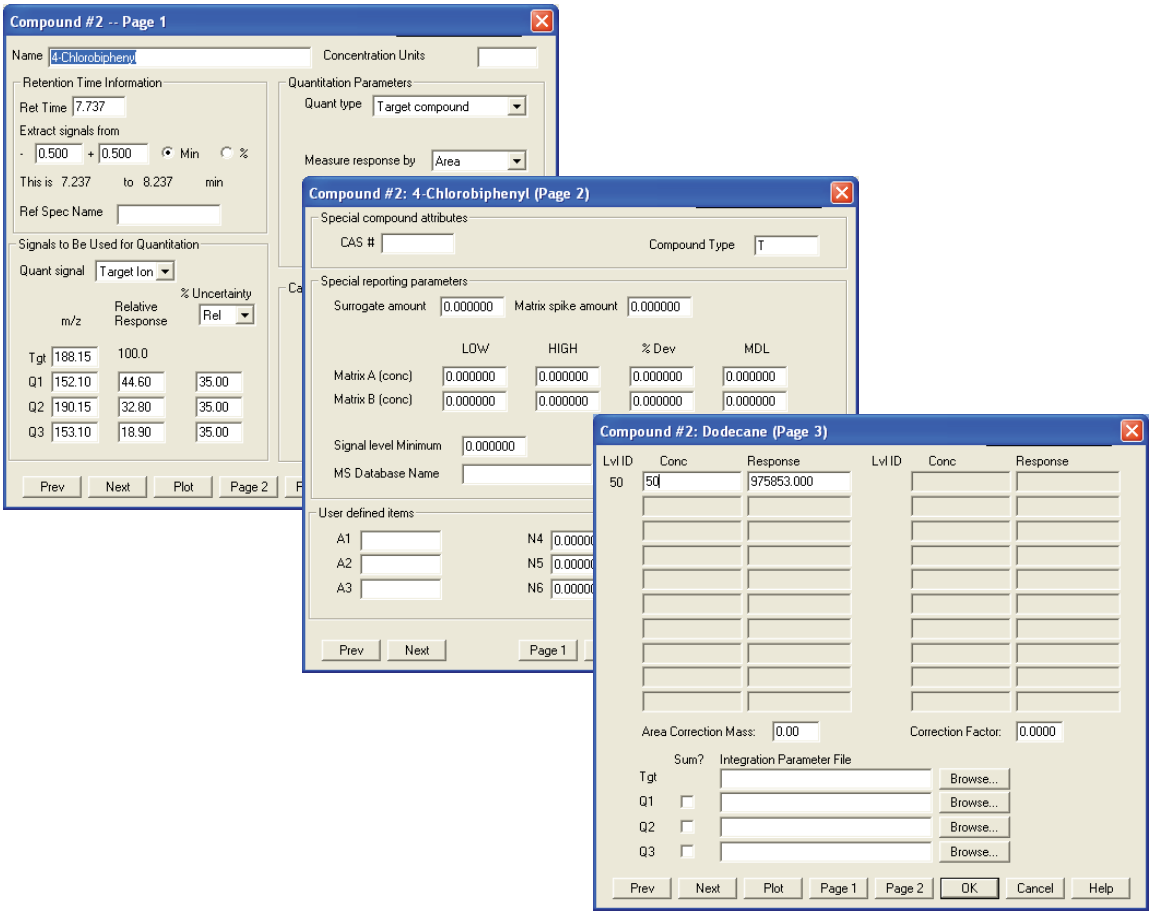
- 棕榈酸甲酯 （标识为内标的化合物）已经移动到了列表的顶部 （尽管它在组内其它两个化合物之后洗脱），并且在其名称旁边有一个星号。
- 此*星号* (*) 表明它为内标。
- 内标的指定*必须先于* 参比此内标的化合物的指定，否则，定量数据库中的顺序将不再重要。



14 现在，完成了此单级别定量数据库条目的所有操作。

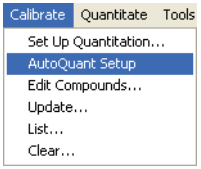
在列表中选择任一化合物，并单击**查看**以在第一、二、三页中检查此化合物的参数。单击**确定**或者**取消**以返回到**编辑化合物**框。

15 单击**退出** 以关闭对话框。

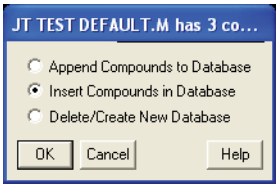

Compound #2 -- Page 1
Name 4-Chlorobiphenyl
Concentration Units
Retention Time Information
Ret Time 7.737
Extract signals from
0.500 0.500 Min %
This is 7.237 to 8.237 min
Ref Spec Name
Quantitation Parameters
Quant type Target compound
Measure response by Area
Signals to Be Used for Quantitation
Quant signal Target Ion
m/z
Relative Response
% Uncertainty
Rel
Tgt 188.15 100.0
Q1 152.10 44.60 35.00
Q2 190.15 32.80 35.00
Q3 153.10 18.90 35.00
Prev Next Plot Page 2
Compound #2: 4-Chlorobiphenyl (Page 2)
Special compound attributes
CAS #
Compound Type T
Special reporting parameters
Surrogate amount 0.000000
Matrix spike amount 0.000000
LOW HIGH % Dev MDL
Matrix A (conc) 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
Matrix B (conc) 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000
Signal level Minimum 0.000000
MS Database Name
User defined items
A1 A2 A3
N4 N5 N6
Prev Next Page 1
Compound #2: Dodecane (Page 3)
Lvl ID Conc Response
50 50 975853.000
Area Correction Mass: 0.00
Correction Factor: 0.0000
Sum? Integration Parameter File
Tgt Q1 Q2 Q3
Browse...
Prev Next Plot Page 1 Page 2 OK Cancel Help

16 现在我们将返回并添加在步骤 7 中跳过的化合物。

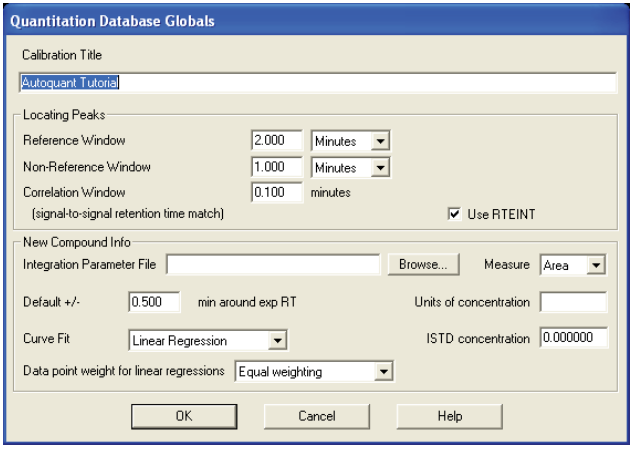
要开始将此化合物插入至定量数据库，请选择**校正 / 自动定量设置**或者单击图标。



17 选择**在数据库中插入化合物**，然后单击**确定**。



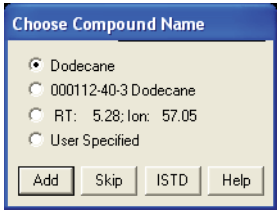
18 出现**定量数据库全局设置**对话框时，切勿更改其中的参数。



单击**确定**。软件将重新启动标识相同峰的过程。

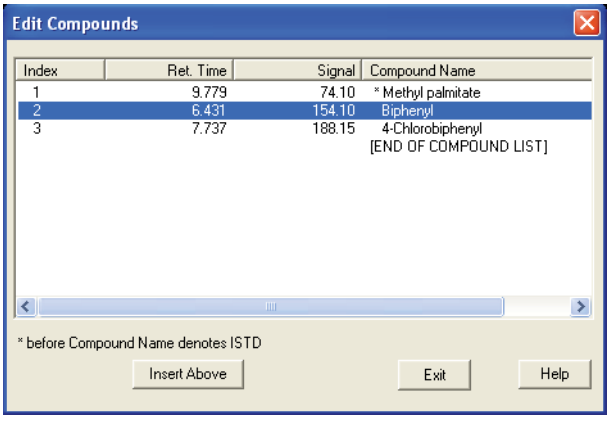
将出现**选择化合物名称**对话框。

19 当十二烷出现在此对话框中时，请保留其默认的名称并单击**添加**。



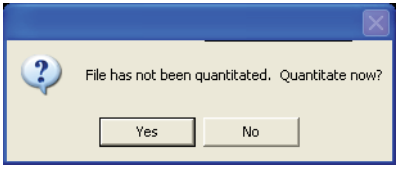
将出现**编辑化合物**框。

20 通过加亮显示联苯选择插入点，并单击**插入以上对象**。



21 将对剩余化合物显示**选择化合物**框。对于数据文件中剩余三个化合物的每个化合物，在系统提示选择化合物名称时，请单击**跳过**，并在系统提示**是否继续峰条目**时，单击**是**。

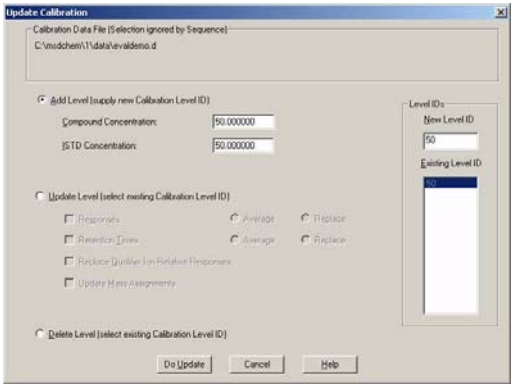
22 在系统询问是否希望定量数据库，请单击**是**。



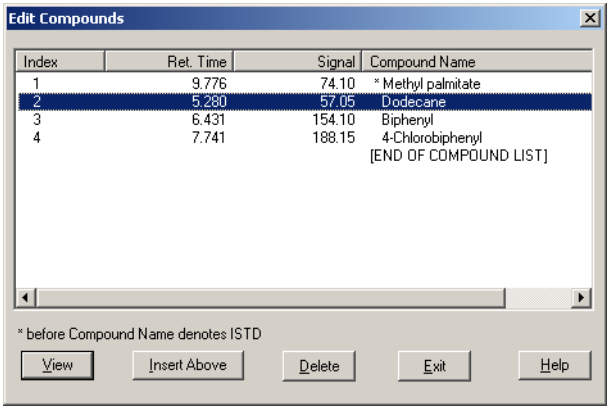
23 出现**更新校正**对话框时，请进行以下选择：分别为 “响应”和 “保留时间”字段选择**重新校正** （从下拉列表中）和**替换** （从下拉列表中）。

重新校正功能为指定的级别 ID 更新所有仪器响应值和保留时间，采用的数据为调用数据文件中的值。返回为此化合物指定的所有其它条目。

单击**执行更新**。



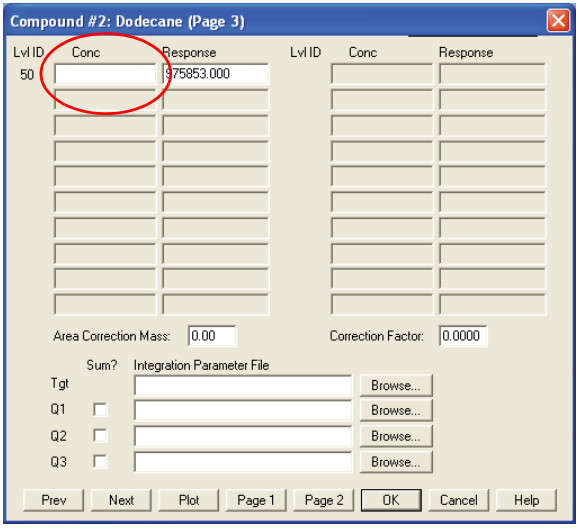
24 出现**编辑化合物**框时，请单击**查看**，并分别检查定量数据库中四种化合物的第三页。



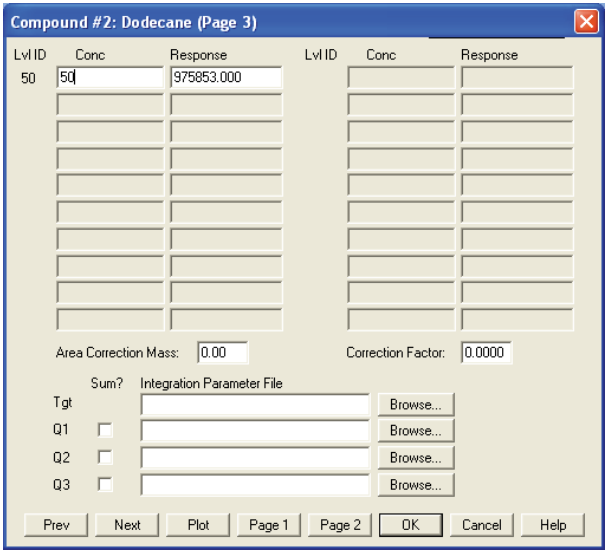
请注意，您刚才添加的十二烷不具有浓度值。

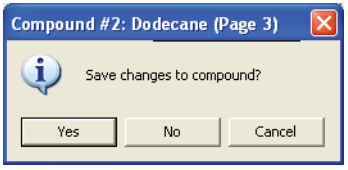
单击**前一页**或者**下一页**，以检查其它化合物的第三页。其它化合物的浓度值是 50。

此值是在最初创建级别时 （在步骤 12 中）全局设置输入的。



25 在“浓度”字段中，为级别 50 输入 **50**。单击**确定**，然后单击**是**以保存此更改。

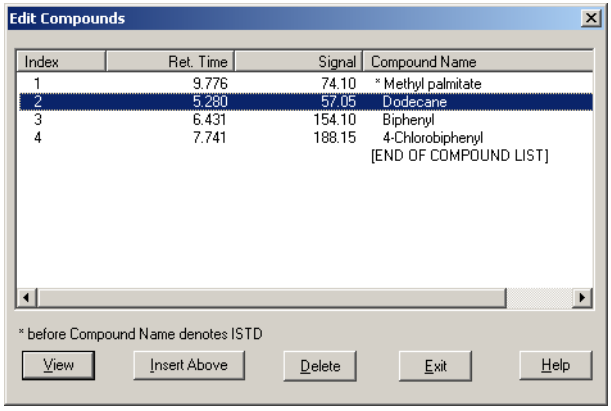




26 现在您回到了**编辑化合物**屏幕。此定量数据库现已更新，并已准备就绪，可以使用了。

单击**退出**以完成此过程。

现在您已经创建了一个包含定量数据库的方法，可以标识和定量联苯、十二烷、一氯联苯和棕榈酸甲酯。



既然您已经完成了本指南，现在可以轻松地通过使用所需的化合物建立自己的定量数据库。

注意

关于如何操作 GC/MSD ChemStation 的详细指导，请查阅联机帮助。

关于硬件操作、维护和故障排除的完整详细信息，请查阅随仪器提供的 CD-ROM 或 DVD-ROM。

3 使用定制报告

定制报告 82
创建报告模板 83
定制报告 87
选择单元格、行和列 92
打印报告 94
创建定制报告数据库 97
选择多个数据文件 100
查看和打印图表 102
定制报告工具栏按钮 103

定制报告

概述

“定制报告”允许您将来自“数据分析”的定量结果传送至定制报告电子表格程序中，在该程序中，您可以创建自己的个性化报告。

您也可以建立多个样品的定制报告数据库，然后查看并打印 数据图表。

如果创建了报告模板或数据库并链接到了某一方法，则只要在方法运行时就可以自动打印报告或更新定制报告数据库。

只能在定量数据上使用定制报告。

入门指南

本章将指导您完成创建定制报告模板或数据库的基本步骤。这些步骤是熟悉使用 “定制报告”软件的起点。

如果有兴趣，请尽量发掘该软件的功能。实践练习编辑或格式设置功能。有关这些功能以及它们如何工作的更多信息，请使用联机帮助。

启动 “定制报告”软件

在 “数据分析”视图中，选择**定量 / 定制报告**或者单击定制报告图标。

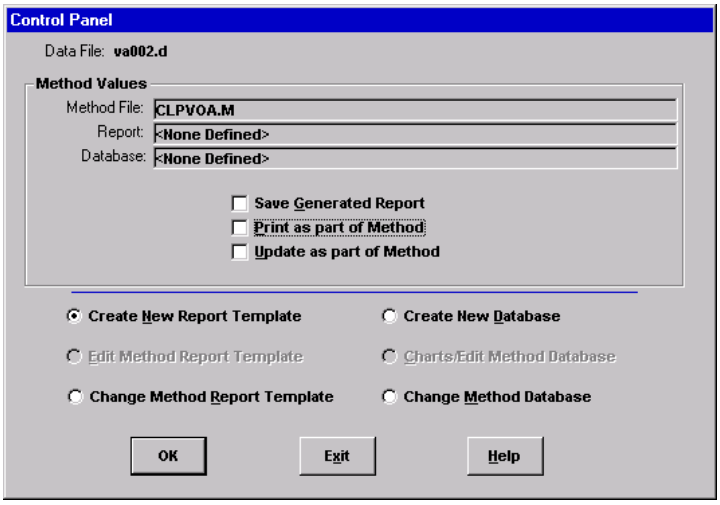
如果当前方法尚未具备定量数据库，或者还没有加载数据文件，则系统将询问您是否希望使用默认值。

单击**确定**。将将出现**定制报告纸张大小** 框，请选择需要的纸张大小，然后单击**确定**。

创建报告模板

启动“定制报告”软件几秒钟之后，将显示“控制面板”（如下图所示）。

1 选择**新建报告模板**并单击**确定**。



新建报告模板	允许您使用“报告向导”建立定制报告模板。
编辑方法报告模板	允许您修改定制报告模板。
更改方法报告模板	允许您选择要与 method.W 一起使用的报告模板
新建数据库	允许您使用“数据库向导”建立定制报告数据库。
图表 / 编辑方法数据库	允许您查看图表，并修改定制报告数据库。
更改方法数据库	允许您选择要与方法一起使用的数据库。

2 显示“报告向导”，并在右侧**报告内容**列表中选择一项。在左侧面板中，**可能的报告项**列出了所有可以选择的、用于报告模板的项。在右侧面板，**报告内容**列出了已经选择的项。

3 在左侧的**可能的报告项**列表中选择一项。

4 双击选定的项或单击**添加**。则所选项就添加到右侧高亮显示项的后面。

5 重复步骤 1 至 4，直到为报告模板添加了所有项。可以使用**删除**，以删除右侧**报告内容**列表中的项。

6 在左侧向下滚动**可能的报告项**列表，将出现一些 “图形”项，这些项可以添加到报告模板中。将 “图形”中的 “图形”项添加到**报告内容标题**部分，而将 “化合物”项添加到**全部化合物**部分。

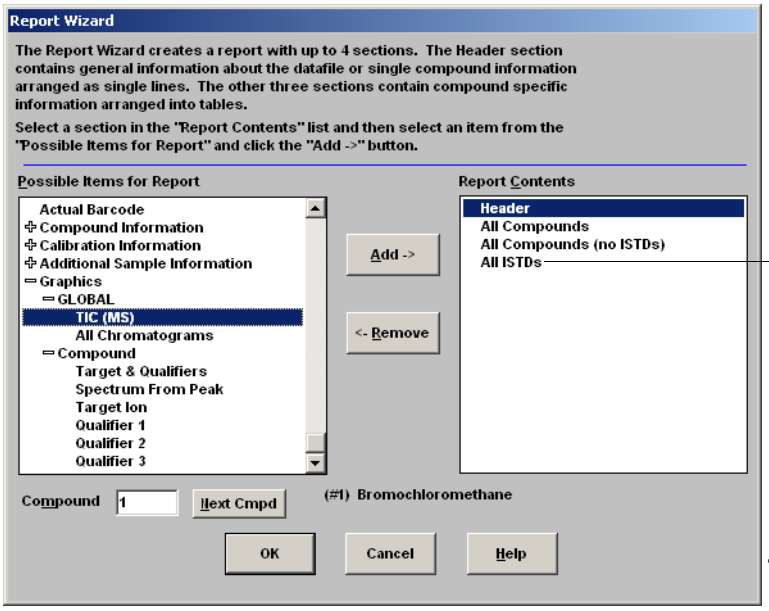
7 在使用 “报告向导”完成了对报告项的选择时，请单击**确定**。

则系统根据用户的选择创建一个报告模板。

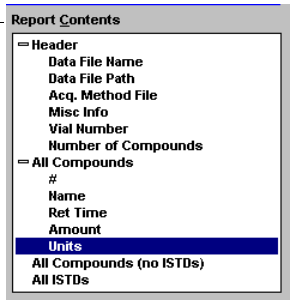
8 将显示 “定制报告工作簿 1”（如下图所示），此刻，可以选择**文件 / 保存**或单击**保存**图标以保存报告模板。

9 接下来，将显示**链接方法**框。本对话框允许您将此模板选择为此方法的默认模板，只要方法运行，则将自动进行打印。

10 选择**文件 / 退出**以退出 “定制报告”程序。

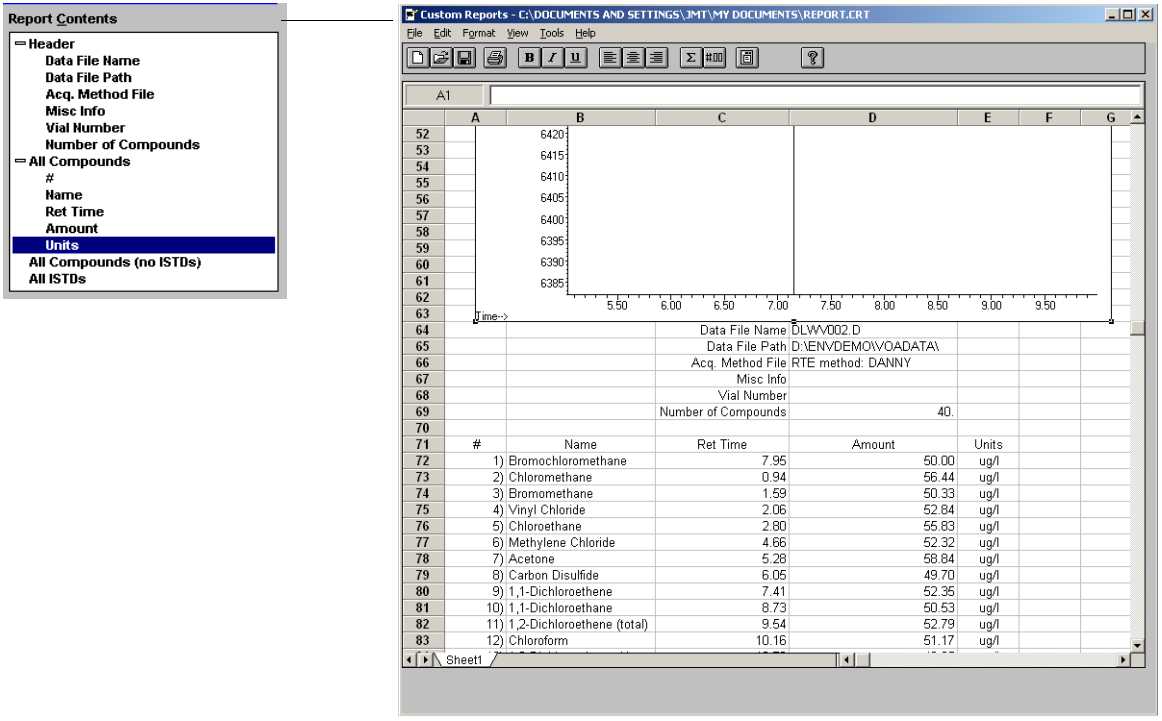


示例



+ 单击加号以打开子项列表

- 单击减号以关闭子项列表


Report Contents
Header
Data File Name
Data File Path
Acq. Method File
Misc Info
Vial Number
Number of Compounds
All Compounds
#
Name
Ret Time
Amount
Units
All Compounds (no ISTDs)
All ISTDs
Custom Reports - C:\DOCUMENTS AND SETTINGS\JMT\MY DOCUMENTS\REPORT.CRT
File Edit Format View Tools Help
A1
Time-->
Data File Name DLWV002.D
Data File Path D:\ENVDEMO\VOADATA\
Acq. Method File RTE method: DANNY
Misc Info
Vial Number
Number of Compounds 40.
Name Ret Time Amount Units
1) Bromochloromethane 7.95 50.00 ug/l
2) Chloromethane 0.94 56.44 ug/l
3) Bromomethane 1.59 50.33 ug/l
4) Vinyl Chloride 2.06 52.84 ug/l
5) Chloroethane 2.80 55.83 ug/l
6) Methylene Chloride 4.66 52.32 ug/l
7) Acetone 5.28 58.84 ug/l
8) Carbon Disulfide 6.05 49.70 ug/l
9) 1,1-Dichloroethene 7.41 52.35 ug/l
10) 1,1-Dichloroethane 8.73 50.53 ug/l
11) 1,2-Dichloroethene (total) 9.54 52.79 ug/l
12) Chloroform 10.16 51.17 ug/l
Sheet1

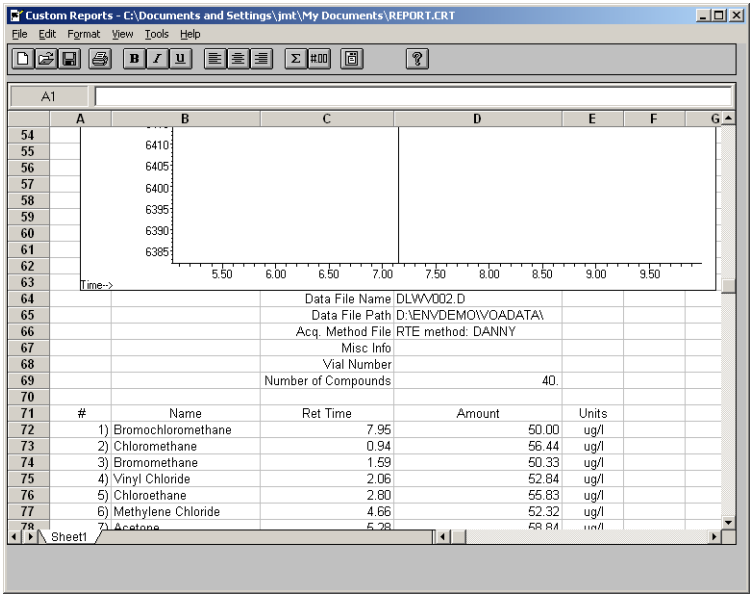
定制报告

编辑报告

1 选择**定量 / 定制报告**或单击**定制报告**图标。将显示 “控制面板”。在 “控制面板”中选择**编辑方法报告模板** <report.CRT>。将显示 “方法值”下的报告 （*<report.CRT> 即* 需要修改的报告模板名称）。

如果没有显示所需的报告名称，则在 “控制面板”中选择**更改方法报告模板**，然后选择所需的报告。当再次显示 “控制面板”时，请选择**编辑 方法报告模板**。

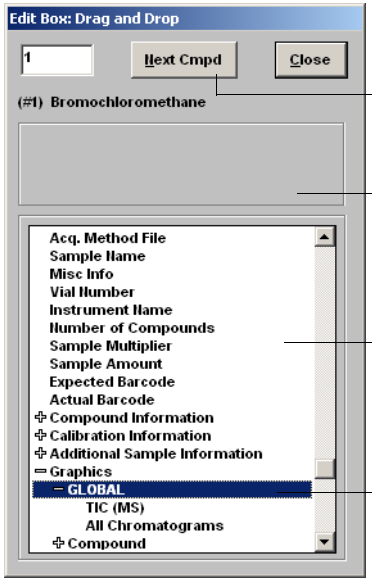
单击**确定**以显示报告模板 *<report.CRT>* 。



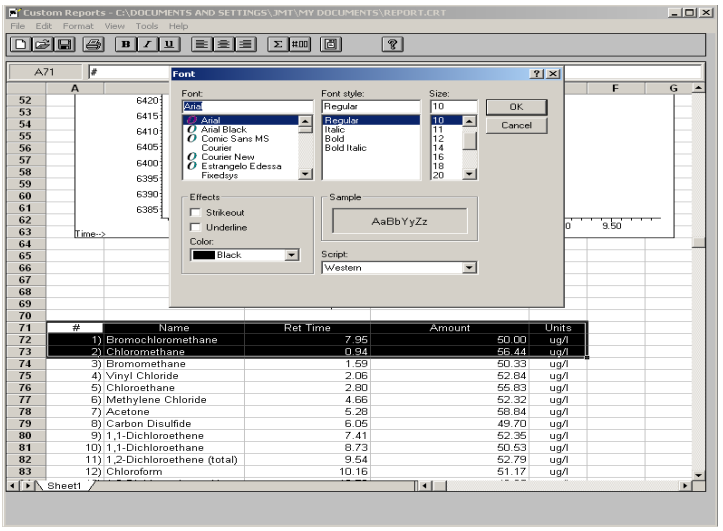
2 可以对电子表格中的所有单元格进行更改。可以使用**编辑框**（如下图所示）以进行更改。也许您希望定期保存报告，以避免丢失任何更改。

3 要访问此对话框，请选择**查看 / 编辑框**，或单击工具栏上的**编辑框**图标。

4 完成修改后，请保存报告模板。



设置报告格式



如果创建了报告模板，则软件将自动对报告进行格式设置。通过执行鼠标操作或使用工具栏，可以使用“格式”菜单定制报告格式。保存报告模板时，将保存所有格式更改。

1 高亮显示要进行格式设置的单元格。

2 通过以下方法之一可以选择一种格式：

- 在“格式”菜单中选择一项。在对话框中进行选择并单击**确定**。
- 单击工具栏中的格式按钮 （例如，粗体或者左对齐）。
- 调整列宽或行高 （如下图所示）。

3 继续进行，直到报告的格式满足您的要求。

4 定期保存报告，以避免丢失任何格式更改，并在操作完成时保存报告模板。

调整行高或列宽

调整行高

1 将光标放在行编号框底部附近，在此位置光标形状会发生变化。

2 通过单击并上下拖动鼠标，以将行高调整至所需的高度。

调整列宽

1 将光标放在列标 （用字母表示）附近，在此处光标形状会发生变化。

2 通过单击并上下拖动鼠标，以将列宽调整至所需的宽度。

使多行具有同一高度

1 在行号列中单击并拖动鼠标以选择多行。

2 调整一行的行高度，即可将其它所有行设置为同一高度。

使多列具有同一宽度

1 在列标 （用字母表示）行中单击并拖动鼠标以选择多列。

2 调整一列的列宽度，即可将其它所有列设置为同一宽度。

保存报告

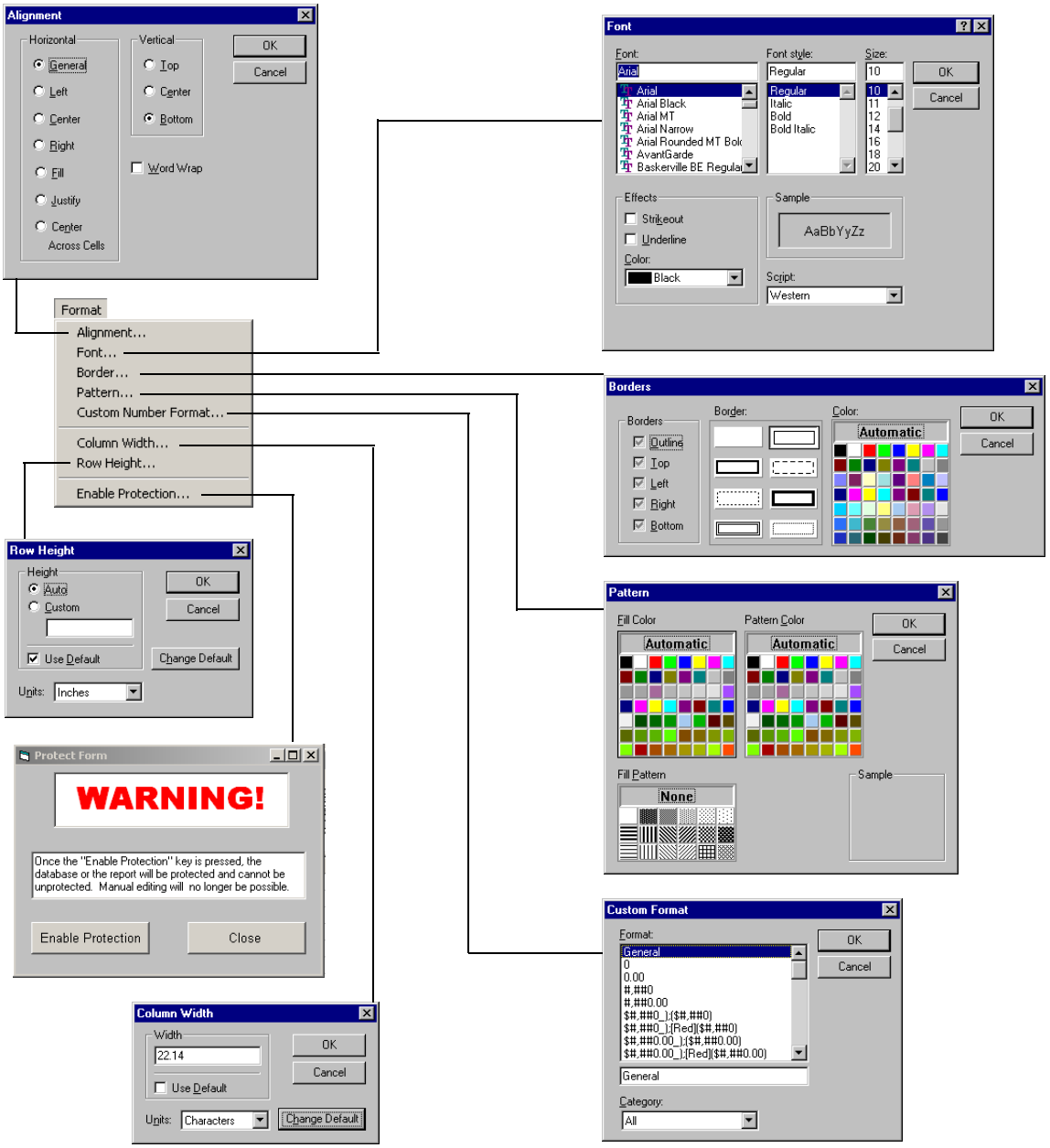
1 选择**文件 / 保存**，或单击工具栏上的**保存**。

2 输入文件名称（切*勿*输入 .CRT 扩展名），并单击**保存**。将显示**链接方法**对话框。本对话框允许您将此模板选择为此方法的默认模板，只要方法运行，则将自动进行打印。

3 选中或取消选中正确的复选框，并单击**确定**。

4 选择**文件 / 退出**，或单击标题栏上的**关闭**以退出“定制报告”。

格式菜单


Alignment
Horizontal
General
Left
Center
Right
Fill
Justify
Center Across Cells
Vertical
Top
Center
Bottom
Word Wrap
OK
Cancel
Font
Font:
Arial
Font style:
Regular
Size:
10
Arial
Arial Black
Arial MT
Arial Narrow
Arial Rounded MT Bold
AvantGarde
Baskerville BE Regular
Regular
Italic
Bold
Bold Italic
11
12
14
16
18
20
Effects
Strikeout
Underline
Color:
Black
Sample
AaBbYyZz
Script:
Western
Format
Alignment...
Font...
Border...
Pattern...
Custom Number Format...
Column Width...
Row Height...
Enable Protection...
Borders
Borders
Outline
Top
Left
Right
Bottom
Border:
Color:
Automatic
Row Height
Height
Auto
Custom
Use Default
Change Default
Units:
Inches
Pattern
Fill Color
Pattern Color
Automatic
Fill Pattern
None
Sample
Protect Form
WARNING!
Once the "Enable Protection" key is pressed, the database or the report will be protected and cannot be unprotected. Manual editing will no longer be possible.
Enable Protection
Close
Custom Format
Format:
General
0
0.00
#,##0
#,##0.00
$#,##0_);($#,##0)
$#,##0_);[Red]($#,##0)
$#,##0.00_);($#,##0.00)
$#,##0.00_);[Red]($#,##0.00)
Category:
All
Column Width
Width
22.14
Use Default
Units:
Characters
Change Default

选择单元格、行和列

选择一组单元格

在电子表格中单击拖动鼠标，以选择一组所需的单元格。

选择一行或一列

单击行号或列标 （用字母表示）。

选择多行或多列

行号或列标 （用字母表示）单击并拖动鼠标。

选择多个非连续的独立单元格

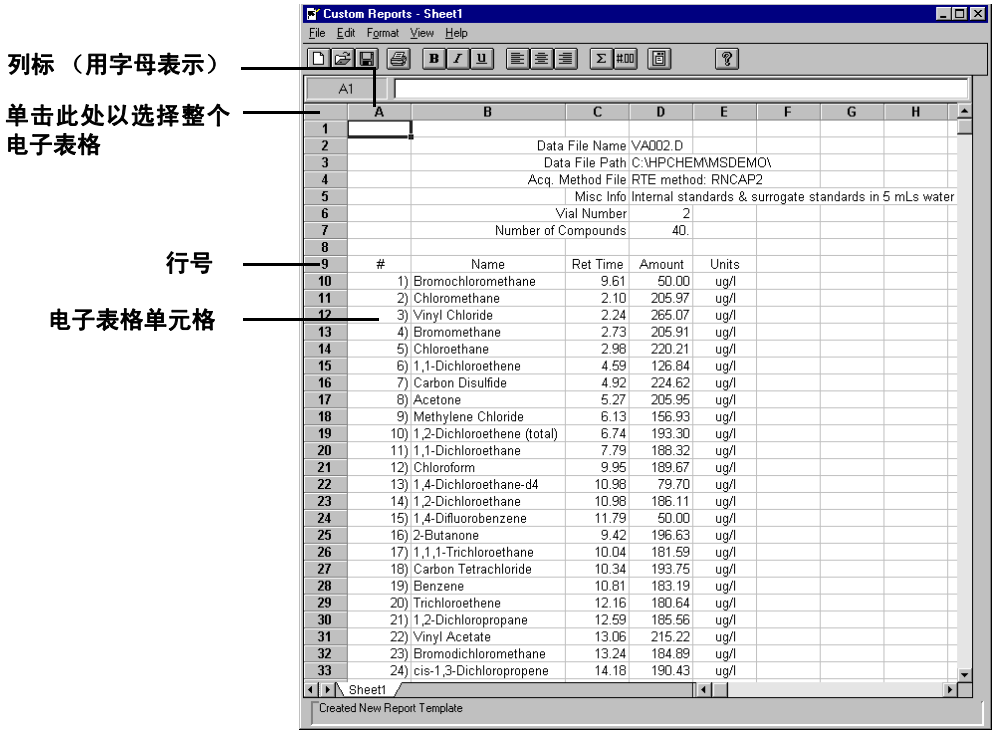
按住 Ctrl 键并单击单元格。

选择多个非连续的行或列

按住 Ctrl 键并单击行号或列标 （用字母表示）。

选择多个连续项

单击需要选择的第一个项 （单元格、列或行）并按下 Shift 键，同时单击组内的最后一项。则介于第一项和最后一项之间的所有项均被选中。


列标 （用字母表示）
单击此处以选择整个电子表格
行号
电子表格单元格
Custom Reports - Sheet1
File Edit Format View Help
A1
Data File Name VA002.D
Data File Path C:\HPCHEM\MSDEMO\
Acq. Method File RTE method: RNCAP2
Misc Info Internal standards & surrogate standards in 5 mLs water
Vial Number 2
Number of Compounds 40.
Name Ret Time Amount Units
1) Bromochloromethane 9.61 50.00 ug/l
2) Chloromethane 2.10 205.97 ug/l
3) Vinyl Chloride 2.24 265.07 ug/l
4) Bromomethane 2.73 205.91 ug/l
5) Chloroethane 2.98 220.21 ug/l
6) 1,1-Dichloroethene 4.59 126.84 ug/l
7) Carbon Disulfide 4.92 224.62 ug/l
8) Acetone 5.27 205.95 ug/l
9) Methylene Chloride 6.13 156.93 ug/l
10) 1,2-Dichloroethene (total) 6.74 193.30 ug/l
11) 1,1-Dichloroethane 7.79 188.32 ug/l
12) Chloroform 9.95 189.67 ug/l
13) 1,4-Dichloroethane-d4 10.98 79.70 ug/l
14) 1,2-Dichloroethane 10.98 186.11 ug/l
15) 1,4-Difluorobenzene 11.79 50.00 ug/l
16) 2-Butanone 9.42 196.63 ug/l
17) 1,1,1-Trichloroethane 10.04 181.59 ug/l
18) Carbon Tetrachloride 10.34 193.75 ug/l
19) Benzene 10.81 183.19 ug/l
20) Trichloroethene 12.16 180.64 ug/l
21) 1,2-Dichloropropane 12.59 185.56 ug/l
22) Vinyl Acetate 13.06 215.22 ug/l
23) Bromodichloromethane 13.24 184.89 ug/l
24) cis-1,3-Dichloropropene 14.18 190.43 ug/l
Sheet1
Created New Report Template

打印报告

创建 （或加载）报告模板

打印之前预览报告

1 选择**文件 / 打印预览。**报告将显示在预览面板中，从中可以看到打印时报告的外观。

2 使用**下一页**和**上一页**，以在相邻的页面之间移动。

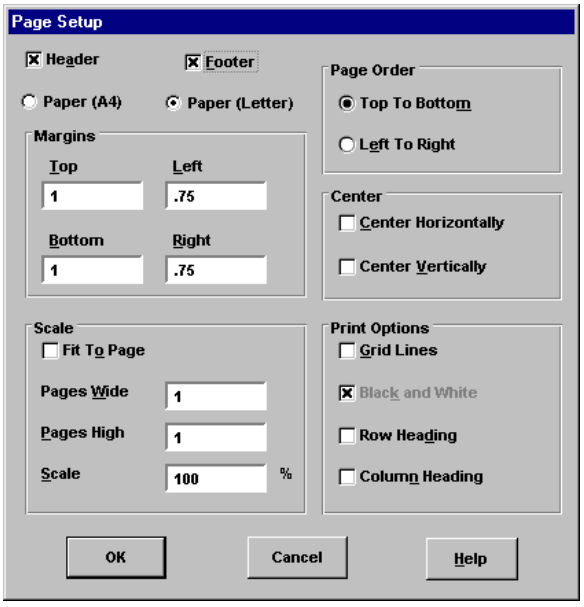
3 单击**打印**。则关闭预览面板，并打印报告。

打印报告

1 选择**文件 / 打印**或单击工具栏上的**打印**。将显示**打印**对话框。

2 选择打印选项（打印范围、副本份数以及打印质量），然后单击**确定**。

使用**文件 / 页面设置**对话框以设置将如何打印页面（单击**帮助**以获取详细信息）。



自动打印报告

在方法运行时，有以下两种方法可以将报告设置为自动打印：

- 创建（或加载）报告模板，然后在“控制面板”的“方法值”部分中选择**打印作为方法部分**。
- 保存报告模板后，将出现**链接方法**对话框。选择**打印报告作为 “运行方法”部分**并单击**确定**。

自动打印多个报告

1 创建（或加载）报告模板。

2 选择**文件 / 多文件选择**。将出现**多文件选择**对话框。

3 选择数据文件所在的目录 （如果还未选择此目录）。

4 选择需要打印的数据文件。

- 选择数据文件名称。
- 双击选定的文件 （或单击向右箭头）。
- 重复上述步骤，直到所有数据文件在**要进行处理而选定的文件**部分中列出。

注意

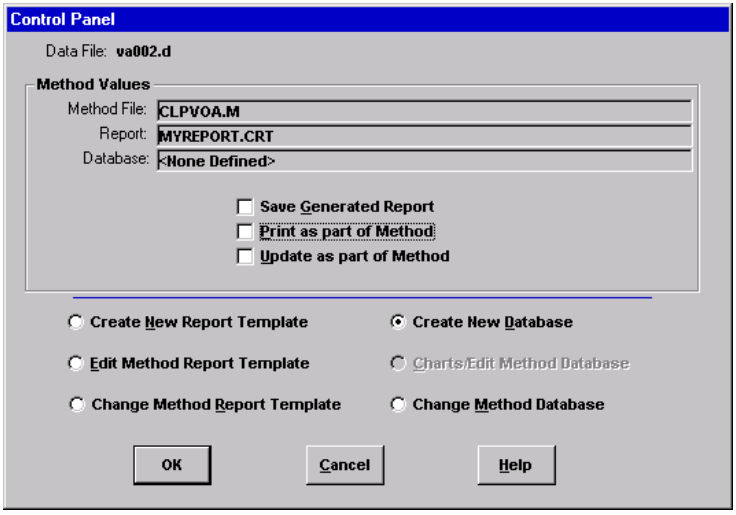
可以分别选择单个文件，或者使用标准的 Windows 文件选择技术将多个文件选择为一组文件。

5 单击**确定**。数据文件将按使用当前报告模板列出的顺序进行打印。

创建定制报告数据库

开始操作之前

- 在“数据分析”视图中，选择**定量 / 定制报告**。
- 如果当前方法尚未具备定量数据库，或者还没有加载数据文件，则系统将询问您是否希望使用默认值。单击**是**，将显示**控制面板**（如下图所示）

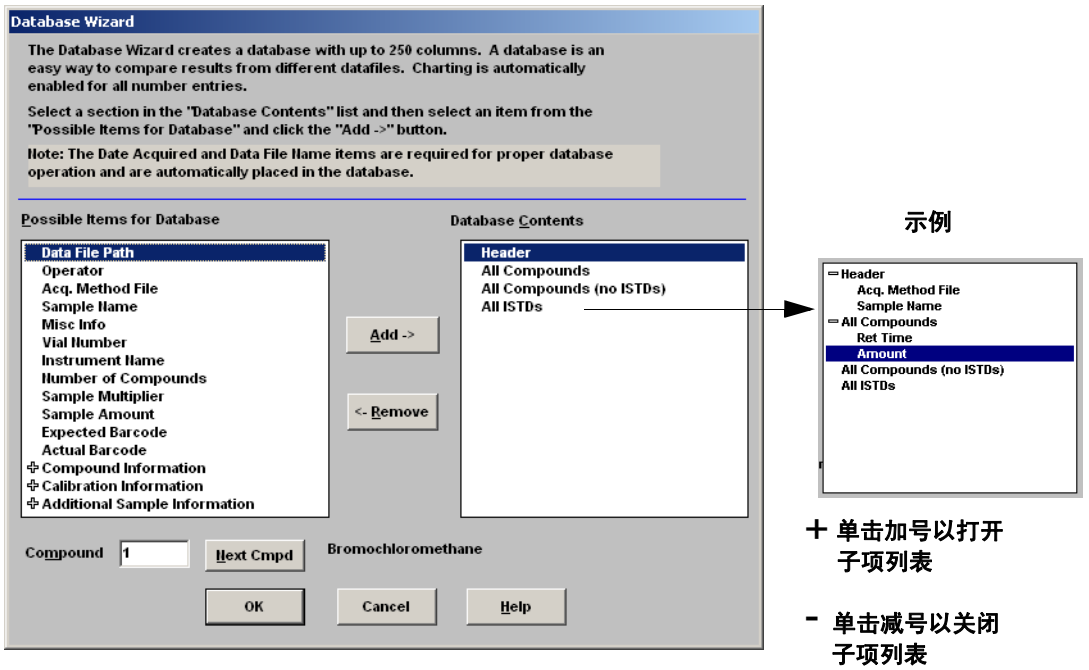


创建数据库的步骤

1 在“控制面板”中选择**新建数据库** 并单击**确定**。

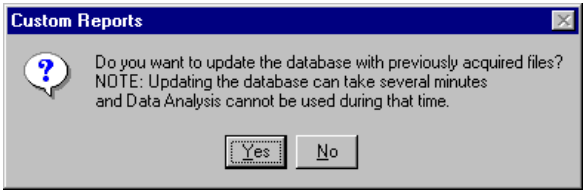
2 将显示**数据库向导**。在左侧，**可能的数据库项**列出所有可以选择的、用于定制报告数据库内容的项。在右侧，**数据库内容**会列出

所有已选择的、并将包含在定制报告数据库中的项。



a 在右侧列表中选择**数据库内容**部分。
b 从左侧**可能的数据库项**列表中选择一项。
c 双击选定的项或单击**添加**。则所选项就添加到右侧高亮显示项的后面。
d 在完成对项的选择后，单击**确定**。

如果在“数据库向导”中单击**确定**，则系统将显示以下提示：

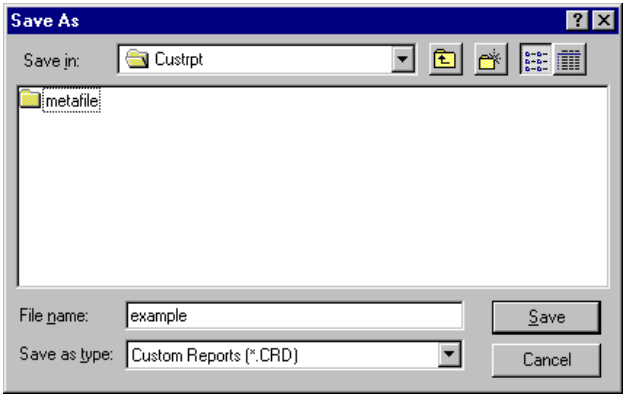


如果您不需要更新数据库，请单击**否**。将显示**控制 面板**。

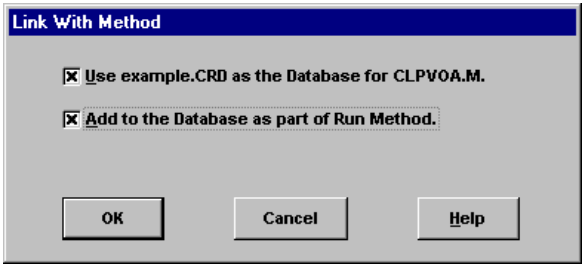
3 如果要更新数据库。

- 单击**是**，将出现**多文件选择**对话框。选择需要添加至数据库的数据文件，然后单击**确定**。

4 显示**另存为**对话框时，请输入文件名称并单击**保存** 。



5 显示**链接方法**对话框时，请选中或取消选中正确的复选框，并单击**确定**。数据库将立即被更新。



选择多个数据文件

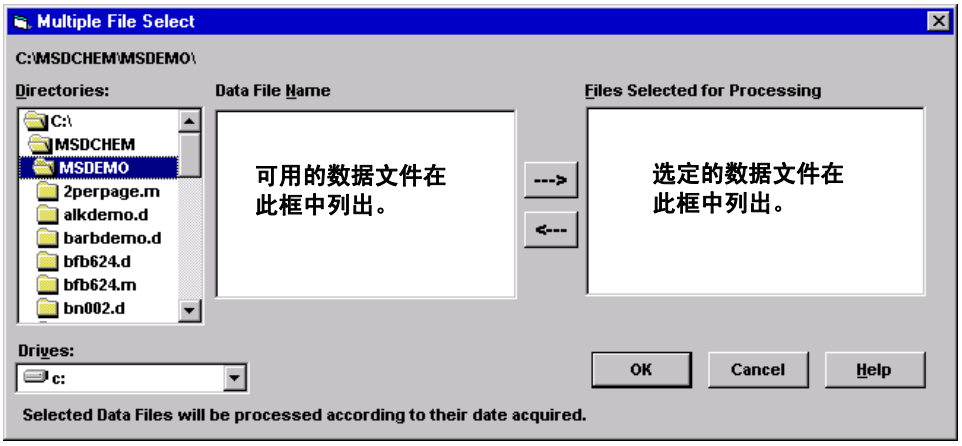
如果需要打印多个报告，或将先前获得的多个数据文件加载至数据库，则使用本对话框。

可以通过选择**文件 / 多个文件选择**来访问本对话框。

1 选择数据文件所在的目录。

2 在**数据文件名称**框中，选择需要使用的数据文件，然后单击向右箭头键 （或双击文件名称）。

3 单击**确定**，以处理选定的数据文件。



依次选择两个或更多文件

单击需要选择的第一个文件，然后拖动鼠标至组内的最后一个文件。

或

单击需要选择的第一个文件。按住 Shift 键，同时单击组内最后的文件。

选择两个或更多非连续的项

按住 Ctrl 键，同时单击每个文件。

取消选择

按住 Ctrl 键，同时单击高亮显示的文件。

对于报告

使用当前报告模板打印选定的数据文件。报告按列出文件的顺序进行打印。

对于数据库

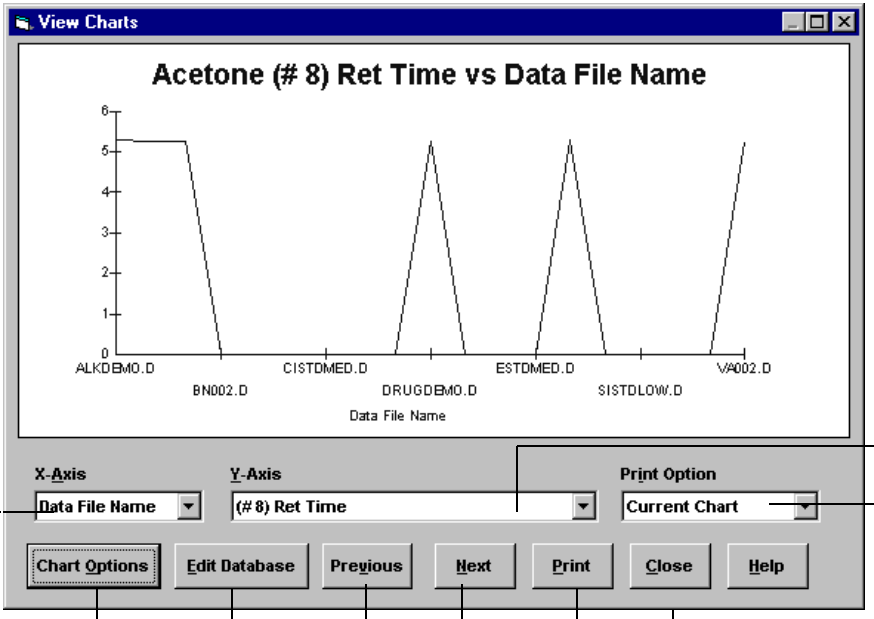
选定的数据文件加载到当前数据库中。当文件加载到数据库时，这些文件将按采集的日期 时间顺序自动存储。

查看和打印图表

选择 “控制面板”中的**图表 / 编辑方法数据库**，将显示以下对话框，单击定制报告工具栏上的**图表**或选择**图表 / 查看图表**。使用此对话框以查看并打印数据库中的数据图表。

注意

单击图表，显示**单个图表选项**对话框。



选择要在 X 轴上绘制的项。默认值是“数据文件名称”和“采集的日期”。

选择要在 Y 轴上绘制的项（仅使用数字项）。

允许您选择打印当前图表或数据库中所有图表。

显示“图表选项”对话框。

退出“查看图表”对话框，并允许您编辑当前数据库。

转到 Y 轴选项框中列出的上一个或下一个图表。

打印当前图表或“打印选项”指定的所有图表。

关闭“查看图表”对话框，并显示“控制面板”。

定制报告工具栏按钮

显示 “控制面板”。

打开定制报告模板 (.crt) 文件或数据库 (.crd) 文件。

保存报告或数据库，然后显示 “链接方法” 对话框。

打印报告或数据库。

对选定文本应用 （或撤消）粗体格式。

对选定的文本应用 （或撤消）斜体格式。

对选定文本应用 （或撤消）下划线格式。

使选定单元格的内容沿单元格左边缘对齐。

使选定单元格左右边缘之间的内容居中。

使选定单元格的内容沿单元格右边缘对齐。

在选定的单元格中插入求此单元格之上所有单元格之和的公式。

显示 “定制格式”对话框。

显示 “编辑框：拖放”对话框。

显示 “查看图表”对话框。此按钮仅用于数据库。

显示联机帮助的 “目录”页。

Agilent Technologies

Agilent Technologies, Inc.

美国印刷， 2006 年 6 月

G1701-97061